

ELEKTROMAGNETISCHE ÜBERGÄNGE
FÜR DAS ZWEELEKTRONENSYSYTEM
IM EXTREM STARKEN MAGNETFELD

von

Heinrich Körbel

aus

Nürnberg

*Diss. Erlangen
1984*

1984 # 145



ELEKTROMAGNETISCHE ÜBERGANGS-
FÜR DAS ZWEI-KOMPONENTENSYSTEM
IM EXTREM STARKEN MAGNETFELD



Digitized by the Internet Archive
in 2026

ELEKTROMAGNETISCHE ÜBERGÄNGE FÜR DAS ZWEELEKTRONENSYSTEM IM EXTREM STARKEN MAGNETFELD

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt

von

Heinrich Körbel

aus

Nürnberg

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen
Fakultäten der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung: 7. Februar 1984

Vorsitzender der Promotionskommission: Prof. Dr. K. Jakobs

Erstberichterstatter: Prof. Dr. H. Ruder

Zweitberichterstatter: Privatdozent Dr. G. Wunner

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, elektromagnetische Übergänge im Heliumatom und in Zweielektronenionen im Bereich, in dem die adiabatische Näherung gültig ist, zu berechnen. Dazu mußten erst die Wellenfunktionen bereitgestellt werden. Als Grundlage diente dazu das von Pröschel [7] umgearbeitete Einkonfigurations-Hartree-Fock-Programm von Frau Froese-Fischer [2], das in der Lage war, die Heliumgrundzustandswellenfunktion mit einem zylindersymmetrischen Ansatz zu berechnen. Dieses Programm mußte dann erheblich verändert werden, um dann damit Wellenfunktionen für angeregte Zustände zu berechnen.

Ausgehend von der Goldenen Regel der Quantenmechanik und unter Anwendung der Dipolnäherung - und unter Ausnutzung der Determinantenrechenregeln - wurden dann die Auswahlregeln für elektromagnetische Übergänge im starken Magnetfeld im Bereich der adiabatischen Näherung aufgestellt.

Berechnet wurden dann im einzelnen für ein hinreichend dichtes Netz von Magnetfeldwerten die Energien von niedrig liegenden Zuständen bei Helium He, Sauerstoff O^{6+} , Silicium Si^{12+} und Eisen Fe^{24+} , sowie eine Auswahl verhältnismäßig starker Übergänge in den genannten Atomen in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke.

Im Anhang werden dann noch die Auswahlregeln mit Hilfe der vollständigen Induktion auf n-Elektronenatome erweitert.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
I. Wellenfunktionen und Energien eines Zweielektronensystems im extrem starken Magnetfeld	8
1. Hamiltonoperator	8
2. Wellenfunktion	9
3. Adiabatische Näherung	10
4. Landauwellenfunktion	12
5. Hartree-Fock-Gleichungen	13
6. Die dimensionslose Form der Hartree-Fock-Gleichungen	17
7. Begründung der Auswahl der berechneten Wellenfunktionen	21
8. Berechnung der Wellenfunktionen und Programmbeschreibung	23
II. Elektromagnetische Übergänge für das H-Atom und das He-Atom im extrem starken Magnetfeld	29
1. Übergangswahrscheinlichkeit	29
2. Auswahlregeln für Übergänge im Wasserstoffatom	30
3. Auswahlregeln für Übergänge im Heliumatom bzw. Zweielektronenatom	33
4. Skalengesetze für die Dipolstärke, Oszillatorstärke und Übergangswahrscheinlichkeit	36
5. Numerische Berechnung der Dipolstärken, Oszillatorstärken, Übergangswahrscheinlichkeiten und Photonenenergien von Übergängen im extrem starken Magnetfeld	38

III.	Ergebnisse	42
1.	Energien	42
2.	Bemerkung zum Zustand $(-1,0) (-2,0)$	47
3.	Ergebnisse für die Dipolstärke, Oszillator- stärke und Übergangswahrscheinlichkeit	50
4.	Niveauschemas für das He-Atom	69
Anhang I		79
Anhang II		95
Literaturverzeichnis		101

Einleitung

Die Forschung über das Verhalten der Materie in extrem starken Magnetfeldern erhielt einen entscheidenden Impuls durch die Entdeckung der Neutronensterne im Jahre 1968. Man darf davon ausgehen, daß beim Gravitationskollaps eines Sterns zu einem Neutronenstern wegen der hohen Leitfähigkeit der Sternmaterie der magnetische Fluß erhalten bleibt. Eine Sternradiusänderung von 10^9 m auf einen typischen Neutronensternradius von 10^4 m hat eine Verkleinerung der Sternoberfläche um das 10^{10} -fache zur Folge und gleichzeitig eine Vergrößerung der Magnetfeldstärke um den gleichen Faktor. Wenn man die für magnetische Sterne üblichen Magnetfelder von 10^1 bis 10^3 Gauß zugrunde legt, dann erhält man auf Neutronensternen Magnetfelder von wahrhaft "astronomischen" Höhen, nämlich 10^{11} bis 10^{13} Gauß. Diese Vermutungen konnten das erste Mal 1977 von Trümper et al. [13] experimentell bestätigt werden, als im Energiespektrum der Röntgenquelle Her X-1 eine Linie mit der Energie 58 keV gemessen wurde, die als Zyklotronstrahlung von Elektronen in einem Magnetfeld von ungefähr $5 \cdot 10^{12}$ Gauß gedeutet wurde. Diese Magnetfelder haben für die Struktur der Atome außerordentlich drastische Konsequenzen. Die Atome werden nadelförmig, weil bereits bei etwa $2 \cdot 10^9$ Gauß die Lorentzkräfte beginnen, die Coulombkräfte in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld zu dominieren, und die Bewegung



der Elektronen nur noch in Richtung des Magnetfeldes von der Coulombkraft wesentlich beeinflusst wird.

Diese - an der irdischen Situation gemessen - völlig neuartigen Verhältnisse machen es im Hinblick auf eine konsequente Beschreibung der physikalischen Eigenschaften magnetisierter Neutronensterne notwendig, die gesamte Energieniveaustruktur, die Wellenfunktionen und die elektromagnetischen Übergänge von Atomen im starken Magnetfeld völlig neu zu berechnen.

Bis 1980 war dies für das Wasserstoffatom und, allgemeiner, für Einelektronensysteme im großen und ganzen abgeschlossen. Erwähnt seien in diesem Zusammenhang die Arbeiten von Wunner [16, 18, 19], Simola und Virtamo [11], Rösner [9, 10] und Canuto und Kelly [1].

Das Zweielektronensystem wurde bisher sehr eingehend in den Arbeiten von Pröschel [7, 8], Thurner [12], Virtamo [15] und Larsen [5] behandelt. Bei Pröschel wurden die Energien und Wellenfunktionen mit einem zylindersymmetrischen Ansatz für den Grundzustand von Helium und von ionischen Zweielektronensystemen bis Fe^{24+} im Bereich, in dem die adiabatische Näherung ($B > 4,7 \cdot 10^9 \text{ G} \cdot Z^2$) gültig ist, in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke berechnet. Thurner berechnete die Energien und elektromagnetischen Übergänge mit Wellenfunktionen, für die ein kugelsymmetrischer Ansatz gewählt wurde, für Zweielektronensysteme in Magnetfeldern, in denen die adiabatische Näherung noch nicht angewendet werden darf. Ziel der vorliegenden Arbeit war es nun, elektromag-

netische Übergänge im Heliumatom und in Zweielektronenionen im Bereich, in dem die adiabatische Näherung gültig ist, zu berechnen. Dazu mußten erst die Wellenfunktionen bereitgestellt werden. Als Grundlage diente dazu das von Pröschel umgearbeitete Einkonfigurations-Hartree-Fock-Programm von Frau Froese-Fischer [2], das in der Lage war, die Heliumgrundzustandswellenfunktion mit einem zylindersymmetrischen Ansatz zu berechnen. Dieses Programm mußte dann erheblich verändert werden, um dann damit Wellenfunktionen für angeregte Zustände zu berechnen.

Ausgehend von der Goldenen Regel der Quantenmechanik und unter Anwendung der Dipolnäherung - und unter Ausnutzung der Determinantenrechenregeln - wurden dann die Auswahlregeln für elektromagnetische Übergänge im starken Magnetfeld im Bereich der adiabatischen Näherung aufgestellt.

Berechnet wurden dann im einzelnen für ein hinreichend dichtes Netz von Magnetfeldwerten die Energien von niedrig liegenden Zuständen bei Helium He, Sauerstoff O^{6+} , Silicium Si^{12+} und Eisen Fe^{24+} , sowie eine Auswahl verhältnismäßig starker Übergänge in den genannten Atomen in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke.

Im Anhang wurden dann noch die Auswahlregeln mit Hilfe der vollständigen Induktion auf n-Elektronenatome erweitert.

I. Wellenfunktionen und Energien eines Zweielektronensystems im extrem starken Magnetfeld.

1. Hamiltonoperator.

Der Hamiltonoperator für ein Atom mit unendlicher Kernmasse, mit zwei Elektronen und der Kernladungszahl Z in einem äußeren homogenen Magnetfeld $\underline{B}$ mit dem zugehörigen Vektorpotential $\underline{A}$ lautet:

$$H = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2m} (\imath \hbar \nabla + e \underline{A})^2 + \mu_i B - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{r}_i - \underline{r}_j|} \quad (1)$$

Der erste Summand hinter dem Summenzeichen bezieht sich auf die kinetische Energie der Elektronen, der zweite stellt die Energie der mit den Spins der Elektronen verbundenen magnetischen Momente dar, der dritte die Coulombsche Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit dem Kern, und der vierte beschreibt schließlich die Coulombsche Wechselwirkungsenergie der Elektronen untereinander.

Die spinmagnetischen Momente haben die Form $\underline{\mu} = \frac{|e|\hbar}{2m} \underline{\sigma}$, wobei $\underline{\sigma}$ den Vektor der Paulischen Spinmatrizen darstellt. Das Magnetfeld wählt man hier zweckmäßig parallel zur z-Achse gerichtet, also $\underline{B} = (0,0,B)$, und das zugehörige Vektorpotential in der Zylindereichung $\underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r}$ ($\text{rot } \underline{A} = \underline{B}$). Wegen der Zylindersymmetrie des Vektorpotentials ist es vorteilhaft, den Hamiltonoperator auf Zylinderkoordinaten umzuformen:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^2 - \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)_i - \frac{ie\hbar}{2m} B \frac{\partial}{\partial \phi_i} + \\
 & + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m} - \frac{|e|\hbar}{2m} \sigma_{z_i} B - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} = \\
 = & \sum_{i=1}^2 h_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 g_{ij}. \quad (2)
 \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator gliedert sich nun in eine Summe aus einem Einteilchen- und einem Zweiteilchenoperator.

2. Wellenfunktion

Die Wellenfunktion muß nach dem Pauliprinzip bezüglich der Vertauschung der Teilchenindices antisymmetrisch sein. In der vorliegenden Arbeit wählt man die übliche Näherung für unabhängige Teilchen (Hartree-Fock-Ansatz), das heißt die Gesamtwellenfunktion ist ein antisymmetrisches Produkt von Einteilchenwellenfunktionen.

Die Spinwellenfunktion kann von der Ortswellenfunktion absepariert werden, weil im Hamiltonoperator keine Wechselwirkung der Spins mit dynamischen Größen berücksichtigt wird.

Bei den hier betrachteten Magnetfeldern mit $B > 4,7 \cdot 10^9 \text{ G}$ sind die Spinumklappenergien größer als 50 eV und damit groß gegenüber bzw. vergleichbar mit den Coulomb-Bindungsenergien.

Für die niedrig liegenden Zustände stehen die beiden Spins antiparallel zum Feld; deshalb wird die Spinwellenfunktion durch einen symmetrischen Triplettzustand beschrieben.

Die Ortswellenfunktion $\Psi(\rho, \phi, z)$ trägt deshalb die Antisymmetrie und wird durch eine Slaterdeterminante beschrieben:

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} u_1(\underline{r}_1) & u_1(\underline{r}_2) \\ u_2(\underline{r}_1) & u_2(\underline{r}_2) \end{vmatrix} \quad (3)$$

Bei den hier verwendeten Magnetfeldern dominieren die Magnetfeldkräfte bei weitem die Coulombkräfte in der ρ, ϕ -Ebene. Es lassen sich deshalb bei Anwendung der weiter unten beschriebenen "adiabatischen Näherung" (Schiff und Snyder [20]) die Wellenfunktionen u_i in Produkte separieren:

$$u_i(\underline{r}_i) = u_{n_i m_i v_i}(\rho_i, \phi_i, z_i) = \phi_{n_i m_i}(\rho_i, \phi_i) f_{m_i v_i}(z_i) \quad (4)$$

Dabei ist ϕ_{nm} die Landauwellenfunktion des Landau-Niveaus mit $n \in \mathbb{N}_0$ und der z-Komponente des Bahndrehimpulses $m \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}_0$. f_{mv} ist die longitudinale Wellenfunktion in z-Richtung mit der Knotenzahl v .

3. Adiabatische Näherung

Anschaulich beschrieben bedeutet die adiabatische Näherung, die für $B \rightarrow \infty$ exakt wird, daß sich das Elektron

senkrecht zum Magnetfeld in der ρ, ϕ -Ebene auf praktisch ungestörten, nur noch von der Lorentzkraft beeinflussten Larmor-Bahnen bewegt, während das Coulomb-Feld des Kerns im wesentlichen nur noch auf die Bewegung des Elektrons in z-Richtung parallel zum äußeren Magnetfeld wirkt. In der ρ, ϕ -Ebene übertrifft die Lorentzkraft die Coulombkraft im Wasserstoffatom sicher dann, wenn der Larmor-radius a_L kleiner wird als der für Coulomb-Bahnen charakteristische Bohrsche Radius a_B .

Durch Gleichsetzen von a_L und a_B gelangt man zu einem Referenz-Magnetfeld B_0 :

$$a_L = \sqrt{\frac{2\hbar}{|e|\hbar B_0}} = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} = a_B \quad (5)$$

Es ergibt sich $B_0 = \frac{2\hbar}{|e|a_B} = 4,7008 \cdot 10^9 \text{ Gauß} = 4,7008 \cdot 10^5 \text{ Tesla}$.

Ist $Z \neq 1$, so führt man ein Referenzfeld B_Z ein über

$$a_L = \sqrt{\frac{2\hbar}{|e|\hbar B_Z}} = \frac{1}{Z} a_B = a_Z \Rightarrow B_Z = Z^2 B_0.$$

Im Rest der Arbeit verwenden wir die Abkürzungen

$$\beta_H = \frac{B}{B_0} \text{ und } \beta_Z = \frac{B}{B_Z} = \frac{\beta_H}{Z^2}.$$

Es hat sich gezeigt, daß für $\beta_Z \geq 1$ die adiabatische Näherung gut erfüllt ist. (Vgl. Rösner [9]).

4. Die Landauwellenfunktion

Wegen der Wichtigkeit für das Folgende sollen hier kurz die Eigenschaften der Landauwellenfunktion beschrieben werden.

Der Hamiltonoperator H für ein freies Teilchen in einem homogenen Magnetfeld $\underline{B} = (0, 0, B)$ lautet in Zylinderkoordinaten:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{ie\hbar}{2m} B \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m} - \frac{|e|\hbar}{2m} \sigma_z B. \quad (6)$$

Die zugehörige Eigenfunktion ist ein Produkt aus der Landauwellenfunktion Φ_{nm} und $e^{ik_z z}$ mit $k_z = \frac{p_z}{\hbar}$.

Ausgeschrieben ist

$$\Phi_{nm}(\rho, \phi) = \frac{1}{a_L \sqrt{\pi n! s!}} e^{i(n-s)\phi} \left(\frac{\rho}{a_L} \right)^{n-s} e^{-\frac{\rho^2}{2a_L^2}} \cdot L_s^{n-s} \left(\frac{\rho^2}{a_L^2} \right). \quad (7)$$

mit $s = n - m$ und L_s^{n-s} dem assoziierten Laguerre-Polynom.

Die Landauwellenfunktionen sind orthonormiert bezüglich n und m . Der Faktor $e^{ik_z z}$ sagt aus, daß das Teilchen, wenn kein Coulombfeld vorhanden ist, in z -Richtung frei beweglich ist. Die zu H gehörigen Eigenwerte sind die Energien E_n des n -ten Landauniveaus:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} + s^* \right) + \frac{p_z^2}{2m} = E_I + E_{II} \quad \text{mit } \omega = \frac{|e|\hbar B}{m}.$$

Zu jedem Eigenwert E_n gibt es unendlich viele linear unabhängige Eigenfunktionen Φ_{nm} .

Im extrem starken Magnetfeld können nur für $n=0$ und die Spinquantenzahl $s^* = -\frac{1}{2}$, also $E_{\perp} = 0$, im strengen Sinne gebundene Zustände auftreten. Zustände mit $n \neq 0$ oder $s^* \neq -\frac{1}{2}$ haben positive Energien $E_{\perp}$, die weit über der Coulombbindungsenergie liegen, und sind metastabil bezüglich Autoionisation (Simola und Virtamo [11], Friedrich und Chu [22] bzw. instabil gegen Zyklotronemission (vgl. Wunner et al. [23]).

Für $n=0$ und $m \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}$ legen wir $\phi_{0m} = \phi_m$ fest, und es gilt dann:

$$\phi_m(\rho, \phi) = \frac{1}{a_L \sqrt{\pi s!}} e^{i|m|\phi} \left(\frac{\rho}{a_L}\right)^{|m|} e^{-\frac{\rho^2}{2a_L^2}} L_{|m|} \left(\frac{\rho^2}{a_L^2}\right) \quad (8)$$

5. Hartree-Fock-Gleichungen.

Die Hartree-Fock-Gleichungen können aus dem Schrödingerschen Variationsprinzip

$$E = \int \Psi^* H \Psi d\tau = \text{Min} \quad (9)$$

mit der Nebenbedingung $\int \Psi^* \Psi d\tau = 1$ abgeleitet werden.

Für E ergibt sich bei der hier in Form einer Slaterdeterminante dargestellten Wellenfunktion

$$\Psi(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} u_{v_1 m_1}(\underline{r}_1) & u_{v_1 m_1}(\underline{r}_2) \\ u_{v_2 m_2}(\underline{r}_1) & u_{v_2 m_2}(\underline{r}_2) \end{vmatrix}, \text{ wobei}$$

$n_1 = n_2 = 0$, $u_{v_i m_i}(\underline{r}_i) = \phi_{m_i}(\rho_i, \phi_i) f_{v_i m_i}(z_i)$ und H der unter (2) angegebene Hamiltonoperator ist:

$$E = \int \Psi^* H \Psi d\tau = \int \Psi^* (\rho, \phi, z) H \Psi (\rho, \phi, z) \rho d\rho d\phi dz =$$

$$= \sum_{i=1}^2 \int u_{v_{i m_i}}^* h_i u_{v_{i m_i}} d\tau +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \int \int u_{v_{i m_i}}^* (\underline{r}_1) u_{v_{j m_j}}^* (\underline{r}_2) g_{12} u_{v_{i m_i}} (\underline{r}_1) u_{v_{j m_j}} (\underline{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 -$$

$$- \int \int u_{v_{i m_i}}^* (\underline{r}_1) u_{v_{j m_j}}^* (\underline{r}_2) g_{12} u_{v_{j m_j}} (\underline{r}_1) u_{v_{i m_i}} (\underline{r}_2) d\tau_1 d\tau_2). \quad (10)$$

Die in der Arbeit von Pröschel [7] durchgeführte Berechnung des Ausdrucks ergibt:

$$E = \sum_{i=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_{i m_i}}(z_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_{m_i}^{\text{eff}}(z_i) \right) f_{v_{i m_i}}(z_i) dz_i +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_{i m_i}}(z_1) f_{v_{j m_j}}(z_2) V_{m_i m_j}^{\text{Di}}(z_1, z_2) f_{v_{i m_i}}(z_1) f_{v_{j m_j}}(z_2) dz_2 dz_1 - \right.$$

$$\left. - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_{i m_i}}(z_1) f_{v_{j m_j}}(z_2) V_{m_i m_j}^{\text{Ex}}(z_1, z_2) f_{v_{j m_j}}(z_1) f_{v_{i m_i}}(z_2) dz_2 dz_1 \right). \quad (11)$$

Das effektive Potential $V_{m_i}^{\text{eff}}(z)$ hat dabei die Form:

$$V_{m_i}^{\text{eff}}(z) = - \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} f_m^*(\rho, \phi) \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi_m(\rho, \phi) d\phi \rho d\rho \quad (12)$$

$$\text{mit } r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$$

Definiert man noch $V_m^{\text{eff}}(z) = - \frac{Ze^2 \sqrt{\pi}}{4\pi\epsilon_0 a_L} V_m^{\text{eff}}(z)$ und führt die Integration aus, dann ergibt sich insbesondere für die effektiven Potentiale mit $\lambda = \frac{|z|}{a_L}$ als Polynomentwicklung:

$$V_0^{\text{eff}}(z) = -e^{\lambda^2} \operatorname{erfc} \lambda$$

$$V_{-1}^{\text{eff}}(z) = - (e^{\lambda^2} \operatorname{erfc} \lambda \cdot (\frac{1}{2} - \lambda^2) + \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}})$$

$$V_{-2}^{\text{eff}}(z) = - (e^{\lambda^2} \operatorname{erfc} \lambda \cdot (\frac{3}{8} - \frac{1}{2}\lambda^2 + \frac{1}{2}\lambda^4) + \frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{3}{4}\lambda - \frac{1}{2}\lambda^3))$$

$$V_{-3}^{\text{eff}}(z) = - (e^{\lambda^2} \operatorname{erfc} \lambda \cdot (\frac{5}{16} - \frac{3}{8}\lambda^2 + \frac{1}{4}\lambda^4 - \frac{1}{6}\lambda^6) + \frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{5}{8}\lambda - \frac{1}{3}\lambda^3 + \frac{1}{6}\lambda^5)).$$

(13)

Das effektive direkte Zweiteilchenpotential $V_{m_1 m_2}^{\text{Di}}(z_1, z_2)$ und das effektive Elektron-Elektron Zweiteilchenaustauschpotential $V_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}(z_1, z_2)$ läßt sich jeweils als Linearkombination effektiver Zweiteilchenpotentiale mit $Z = 1$ darstellen.

$$\begin{aligned} V_{m_1 m_2}^{\text{Di}}(z_1, z_2) &= \sum_{k=0}^{|m_1+m_2|} c_k(m_1, m_2) V_k^{\text{eff}}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2}. \\ V_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}(z_1, z_2) &= \sum_{k=0}^{|m_1+m_2|} d_k(m_1, m_2) V_k^{\text{eff}}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Die Koeffizienten $c_k(m_1, m_2)$ und $d_k(m_1, m_2)$ wurden bei Pröschel et al. [8] und Virtamo [15] veröffentlicht.

In Tabelle 1 sind die in dieser Arbeit benötigten Koeffizienten zusammengefaßt.

Setzt man nun das Energiefunktional E (11) in die Variationsgleichung (9) ein und koppelt die Nebenbedingung an, dann erhält man - in der Arbeit von Pröschel wird dies ausführlich durchgeführt - folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_{m_i}^{\text{eff}}(z_i) + \right. \\
 & + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} f_{v_j m_j}(z_2) f_{v_j m_j}(z_2) V_{m_i m_j}^{\text{Di}}(z_1, z_2) dz_2 + \lambda_{ii} \right) f_{v_i m_i}(z_1) = \\
 & = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 f_{v_j m_j}(z_1) \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_j m_j}(z_2) f_{v_i m_i}(z_2) V_{m_i m_j}^{\text{Ex}}(z_1, z_2) dz_2. \quad (15)
 \end{aligned}$$

Die λ_{ii} nennt man diagonale Lagrange-Parameter. Ihre explizite Darstellung und die dazugehörige Herleitung sind bei Pröschel ([7] Seite 38) angegeben.

m_1	m_2	k				
		0	1	2	3	4
0	0	1				
1	0	0.5	± 0.5			
1	1	0.5	0	0.5		
2	0	0.25	± 0.5	0.25		
2	1	0.375	± 0.125	0.125	± 0.375	
2	2	0.375	0	0.25	0	0.375
3	0	0.125	± 0.375	0.375	± 0.125	
3	1	0.25	± 0.25	0	± 0.25	0.25

Tab.1: Die oberen Vorzeichen gelten für die $c_k(m_1, m_2)$ und die unteren Vorzeichen für die $d_k(m_1, m_2)$.

6. Die dimensionslose Form der Hartree-Fock-Gleichung.

Um die Gleichung (15) numerisch besser handhaben zu können, und damit die Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z deutlich hervortritt, werden dimensionslose Größen eingeführt.

Die Energien werden in Einheiten von E_Z , die Längen in Einheiten von a_Z und die Magnetfeldstärken in Einheiten von B_Z gemessen.

Dabei ist:

$$E_Z = Z^2 E_H \text{ mit der Rydbergenergie } E_H = \frac{1}{2} m \alpha^2 c^2 = 13.6058 \text{ eV}$$

$$a_Z = \frac{a_B}{Z}$$

$$B_Z = Z^2 B_0 \text{ mit } \beta_Z = \frac{B}{B_Z} \quad (16)$$

Die Gleichung (15) wird mit E_Z dividiert und mit -1 multipliziert.

$$\text{Aus } \frac{\hbar^2}{2mE_Z} \frac{d^2}{dz^2} \text{ wird dann } a_Z^2 \frac{d^2}{dz^2} = \frac{d^2}{\hat{z}^2}, \text{ wenn man noch}$$

$$\hat{z} = \frac{z}{a_Z} \text{ setzt.}$$

Bei der Division des effektiven Potentials $V_m^{\text{eff}}(z)$ durch E_Z erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{V_m^{\text{eff}}(z)}{E_Z} &= \frac{-Ze^2 \sqrt{\pi}}{4\pi \epsilon_0 a_L E_Z} V_m^{\text{eff}}(z) = \frac{-Ze^2 \sqrt{\pi} 2a_B 4\pi \epsilon_0}{4\pi \epsilon_0 a_L Z^2 e^2} V_m^{\text{eff}}(z) = \\ &= -2 \frac{a_B}{a_L Z} \sqrt{\pi} V_m^{\text{eff}}(z) = -2 \sqrt{\beta_Z} \sqrt{\pi} V_m^{\text{eff}}(z). \end{aligned} \quad (17)$$

z wird durch $\hat{z} = \frac{z}{a_Z}$ ersetzt.

Dabei ist

$$\frac{z}{a_L} = \hat{z} \sqrt{\beta_z}$$

und man setzt:

$$-2\sqrt{\beta_z} \sqrt{\pi} V_m^{*eff}(z) = -2\sqrt{\beta_z} \sqrt{\pi} \hat{V}_m^{*eff}(\hat{z}) = \hat{V}_m^{eff}(\hat{z}) . \quad (18)$$

Für $V_{m_1, m_2}^{Di}(z_1, z_2) / E_z$ ergibt sich, wobei $z = 1$ in V_k^{eff} ist:

$$\begin{aligned} \frac{V_{m_1 m_2}^{Di}(z_1, z_2)}{E_z} &= \left| \sum_{k=0}^{m_1+m_2} c_k(m_1, m_2) V_k^{eff}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2} \frac{1}{E_z} \right| \\ &= \frac{-e^2 \sqrt{\pi}}{4\pi \epsilon_0 a_L E_z} \left| \sum_{k=0}^{m_1+m_2} c_k(m_1, m_2) V_k^{*eff}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2} \right| \\ &= 2\sqrt{\pi} \sqrt{\beta_z} \frac{1}{\hat{z}} \left| \sum_{k=0}^{m_1+m_2} c_k(m_1, m_2) V_k^{*eff}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2} \right|. \end{aligned} \quad (19)$$

$\frac{z_1-z_2}{a_L}$ wird durch $(\hat{z}_1 - \hat{z}_2) \cdot \sqrt{\beta_z}$ ersetzt und man definiert

$$\hat{V}_k^{*eff}\left(\frac{\hat{z}_1 - \hat{z}_2}{\sqrt{2}}\right) = V_k^{*eff}\left(\frac{z_1 - z_2}{\sqrt{2}}\right) .$$

Es gilt dann für das effektive direkte Zweiteilchenpotential:

$$\begin{aligned} \frac{V_{m_1 m_2}^{Di}(z_1, z_2)}{E_z} &= 2\sqrt{\beta_z} \sqrt{\pi} \frac{1}{\hat{z}} \left| \sum_{k=0}^{m_1+m_2} c_k(m_1, m_2) \hat{V}_k^{*eff}\left(\frac{\hat{z}_1 - \hat{z}_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2} \right| \\ &= \frac{1}{\hat{z}} \hat{V}_{m_1, m_2}^{Di}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) . \end{aligned} \quad (20)$$

Analog ergibt sich, wie in (18), (19) und (20) ausgeführt, für das effektive Elektron-Elektron Zweiteilchen-austauschpotential:

$$\frac{V_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}(z_1, z_2)}{E_Z} = 2\sqrt{\beta_Z} \sqrt{\pi} \frac{1}{Z} \sum_{k=0}^{|m_1+m_2|} d_k(m_1, m_2) \hat{V}_k^{\text{eff}}\left(\frac{z_1-z_2}{\sqrt{2}}\right) \frac{1}{2}\sqrt{2} =$$

$$= \frac{1}{Z} \hat{V}_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}(\hat{z}_1, \hat{z}_2). \quad (21)$$

Die Hartree-Fock-Gleichungen (15) nehmen dann folgende, völlig dimensionslose Form an, wobei man noch, um die Gleichung etwas übersichtlicher zu machen, die Abkürzungen

$$Y_{m_1 m_2}(\hat{z}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_j m_j}(\hat{z}_2) f_{v_j m_j}(\hat{z}_2) \hat{V}_{m_1 m_2}^{\text{Di}}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) d\hat{z}_2 \quad \text{und}$$

$$X_{m_1 m_2}(\hat{z}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_j m_j}(\hat{z}_2) f_{v_i m_i}(\hat{z}_2) V_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) d\hat{z}_2$$

eingführt und $\frac{1}{Z}$ ausklammert:

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{z}^2} - \hat{V}_{m_i}^{\text{eff}}(\hat{z}_i) - \frac{\lambda_{ii}}{E_Z}\right) f_{v_i m_i}(\hat{z}_1) =$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 (Y_{m_i m_j}(\hat{z}_1) f_{v_i m_i}(\hat{z}_1) - f_{v_j m_j}(\hat{z}_1) X_{m_i m_j}(\hat{z}_1)) \quad (22)$$

Die Gesamtenergie des Hartree-Fock-Zustandes ist allgemein:

$$E_{\text{Ges}} = \sum_{i=1}^{\lambda_{ii}} \frac{\lambda_{ii}}{E_Z} - \frac{1}{2Z} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} f_{v_i m_i}(\hat{z}_1) Y_{m_i m_j}(\hat{z}_1) f_{v_i m_i}(\hat{z}_1) d\hat{z}_1 - \right.$$

$$\left. - \int_{-\infty}^{\infty} f_{v_i m_i}(\hat{z}_1) X_{m_i m_j}(\hat{z}_1) f_{v_j m_j}(\hat{z}_1) d\hat{z}_1 \right) = \sum_{i=1}^2 \frac{\lambda_{ii}}{E_Z} - E_{12}. \quad (23)$$

Als besondere Eigenschaft der Gleichung (22) ist bemerkenswert, daß sie für $Z \rightarrow \infty$ zur Gleichung zur Berechnung der Wasserstoffwellenfunktion entartet.

Denn

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \hat{V}_m^{\text{eff}}(\hat{z}) - \frac{\lambda_{ii}}{E_Z} \right) \cdot f_{\nu_m}(\hat{z}) = 0 \quad (24)$$

ist gerade die Schrödingergleichung zur Berechnung der Wasserstoffwellenfunktion.

7. Begründung der Auswahl der berechneten Wellenfunktionen.

Da es natürlich nicht möglich ist, alle Wellenfunktionen zu berechnen, mußte eine physikalisch sinnvolle Auswahl getroffen werden.

Bei der Berechnung der Energiestufen des Wasserstoffatoms im starken Magnetfeld hat sich gezeigt, daß es für jede Drehimpulsprojektionsquantenzahl m einen Zustand mit gerader z -Parität und Knotenzahl $v = 0$ gibt, dessen Energie gegenüber den Zuständen mit $v \neq 0$ stark abgesenkt ist. Einen solchen Zustand nennt man stark-gebunden (tightly-bound). Die Beträge dieser Energien nehmen mit wachsendem β_z noch beträchtlich zu. Bei $\beta_z = 10$ beträgt sie bei Einelektronensystemen 4.2986 Rydbergeinheiten und bei $\beta_z = 1\,000$ bereits 18.5738 Rydbergeinheiten. Alle anderen Zustände mit $v \neq 0$ dagegen haben eine Energie, die kleiner ist als 1 Rydbergeinheit; sie werden als wasserstoffähnliche Zustände bezeichnet.

Bei Zweielektronenzuständen kann man deshalb grundsätzlich drei Arten im nullten Landau-Niveau unterscheiden.

- a) Beide Elektronen sind stark-gebunden, also $m_1 \neq m_2$ und $v_1 = v_2 = 0$ (doppelt-stark-gebundene Zustände).
- b) Ein Elektron ist stark-gebunden (einfach-stark-gebundene Zustände), d.h. es gilt $v_1 = 0$ und $v_2 \neq 0$, und die Drehimpulsprojektionsquantenzahlen m_1 und m_2 sind beliebig. Von diesen Zuständen sind nur solche wirklich gebunden, bei denen für das stark-gebundene Elektron $m = 0$ ist. Alle anderen Zustände sind nicht gebunden,

weil sie mit ihrer Gesamtenergie weit über der Ionisierungsenergie im Kontinuum eingebettet liegen und daher autoionisieren können ("Auger Effekt").

- c) Beide Elektronen besetzen einen Zustand des wasserstoffähnlichen Spektrums (höhere Zustände), d.h. $v_1 \neq 0$ und $v_2 \neq 0$. Auch diese Zustände können strahlungslose Autoionisierungsübergänge ins Kontinuum durchführen.

Weil in dieser Arbeit keine Kontinuums-Zustände betrachtet werden, wurden von vorneherein die höheren Zustände und diejenigen einfach-stark-gebundenen Zustände außer acht gelassen, bei deren stark-gebundenem Elektron $m \neq 0$ ist. Von den verbleibenden Möglichkeiten wurde eine Beschränkung auf die Wellenfunktionen, bei denen die Summe M der Drehimpulsprojektionsquantenzahlen m_1 und m_2 0, -1, -2 oder -3 ist, vorgenommen. Von den doppelt-stark-gebundenen Zuständen wurden dann die Wellenfunktionen der Zustände $(0,0)(-1,0)^*$, $(0,0)(-2,0)$ und $(0,0)(-3,0)$ und je eine von den zugehörigen angeregten aus den einfach-stark-gebundenen Zuständen $(0,0)(-1,1)$, $(0,0)(-2,1)$ und $(0,0)(-3,1)$ berechnet. Für $M = 0$ wurden die Wellenfunktionen der Zustände $(0,0)(0,1)$ und

* Im folgenden sei der Zustand der beiden Elektronen eines Zweielektronensystems immer in der Form $(m_1, v_1)(m_2, v_2)$ dargestellt, wobei m_1 und m_2 die Drehimpulsprojektionsquantenzahlen und v_1 und v_2 die Knotenzahlen der longitudinalen Wellenfunktionen sind.

$(0,0)$ $(0,2)$ berechnet.

Für die ausgewählten Zustände sind die Energiedifferenzen, wie im Ergebnisteil gezeigt wird, verhältnismäßig hoch.

Es lassen sich deshalb Übergänge mit sehr hohen Übergangswahrscheinlichkeiten, die ja von der dritten Potenz der Energiedifferenz abhängig sind, berechnen.

8. Berechnung der Wellenfunktionen und Programmbeschreibung.

Zur Berechnung der Wellenfunktionen wurde als Grundlage das Multikonfigurations-Hartree-Fock-Programm von Frau Froese-Fischer nach der von Pröschel modifizierten Form herangezogen.

Dieses Programm war so erstellt, daß mit ihm nur der Grundzustand $(0,0)$ $(-1,0)$ berechnet werden konnte. Zusätzlich war es möglich, die isoelektronische Reihe für diesen Zustand von $Z = 26$ bis $Z = 1$ zu berechnen.

Um jetzt andere Zustände zu rechnen, mußte das Programm erheblich verändert werden, so daß mit ihm die dimensionslose Hartree-Fock-Gleichung (22) gelöst werden konnte. Es wird dann nicht sofort die Wellenfunktion für $Z = 0$ berechnet, sondern die Wellenfunktion für ein möglichst hohes Z , bei dem die Wellenfunktion der Wasserstoffwellenfunktion am ähnlichsten ist. Die erhaltene Wellenfunktion wird dann als Startwellenfunktion für ein vermindertes Z genommen. β_Z wird dabei konstant gelassen; es wird nur die zum jeweiligen Z gehörige B-Feldstärke entsprechend nachgeregelt. β_Z konstant zu

lassen hat den Vorteil, daß die nur von β_Z und $2 = \frac{Z}{a_Z}$ abhängigen effektiven Potentiale und die direkten Zweiteilchenpotentiale und die Elektron-Elektron Zweiteilchenaustauschpotentiale nur einmal für die Startkernladungszahl berechnet werden müssen.

Programmablauf

Bild 1 zeigt schematisch den Programmablauf der sich in zwei Teile gliedert. Teil 1 erzeugt die Startwellenfunktion und Teil 2 führt die Iteration der Wellenfunktion für verschiedene Z durch.

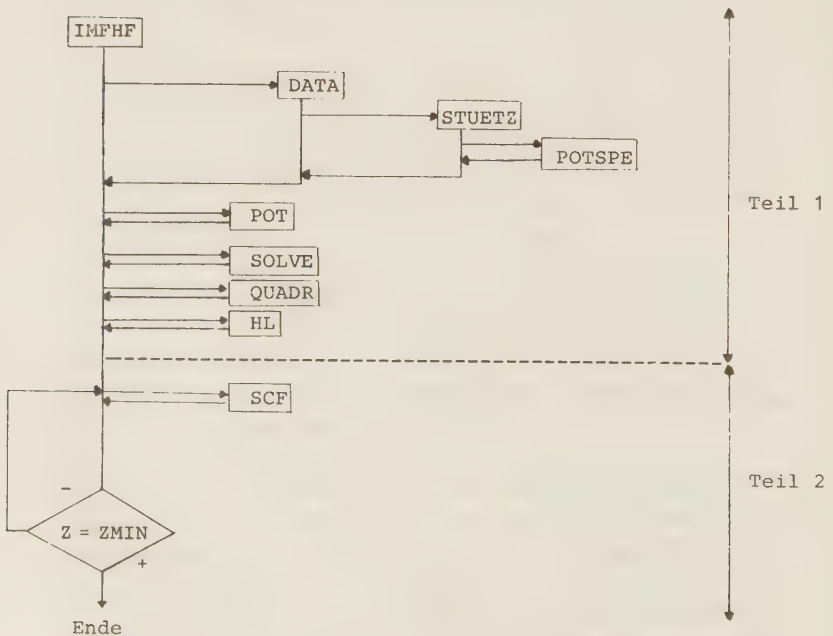


Bild 1: Ablaufschema des Programms

IMFHF:

Im Hauptprogramm IMFHF werden zunächst wichtige Konstanten bereitgestellt und nach Durchlaufen von SCF wird, bevor SCF wiederum aufgerufen wird, Z vermindert und die B-Feldstärke nachgeregelt. Für $Z > 8$ wird Z jeweils um 1 vermindert, für $2 \leq Z \leq 8$ wird Z jeweils um 0.1 vermindert. Für die doppelt-stark-gebundenen Zustände würde eine Kernladungszahlverminderung um 1 auch für $Z < 8$ genügen. Aber für die angeregten Zustände ist eine Kernladungszahlverminderung von nur 0.1 für $Z < 8$ unbedingt erforderlich. Bei dem Zustand $(0,0) (-3,1)$ ist eine Kernladungszahlverminderung von 0.25 für $8 < Z < 24$ für $\beta_z > 5$ zusätzlich notwendig. Für die angeregten Zustände ist eine Startkernladungszahl von größer 26 manchmal erforderlich. Es genügt aber $Z = 99$ immer, wenn die Startenergien hinreichend genau sind.

DATA:

In DATA werden die benötigten Daten und die Startwerte des diagonalen Lagrangeparameters - dies sind die Energien des Wasserstoffatoms - eingelesen. Außerdem werden die Vorfaktoren der effektiven Potentiale berechnet. Die Stützstellen der Wellenfunktionen werden in Einheiten von a_z bereitgestellt.

Die ersten 15 Stützstellen in der Nähe des Ursprungs sind äquidistant und haben den Abstand $\frac{1}{12} e^{-4}$; bei den weiteren 150 Stützstellen nehmen die Abstände zwischen

den Stützstellen exponentiell zu. In der Nähe des Ursprungs, wo sich die Wellenfunktion verhältnismäßig stark ändert, liegen die Stützstellen sehr dicht, und im asymptotischen Bereich der Wellenfunktion, der nur wenig zur Genauigkeit beiträgt, nimmt die Stützstellendichte stark ab. Die nichtäquidistanten Stützstellen werden nach der Formel $\hat{z}_n = e^\rho = e^{-4 + (n-1)h}$, wobei $h = \frac{1}{16}$ ist, berechnet. Die im Programm verwendeten numerischen Integrationsformeln und Differentiationsformeln funktionieren nur für äquidistante Stützstellen. Sie werden deshalb alle als Funktion des Parameters $\rho = -4 + (n-1)h$ ausgedrückt.

STUETZ und POTSPE:

Hier werden die direkten und die Austauschpotentiale als Linearkombinationen der effektiven Potentiale berechnet. Zuerst werden die Ausdrücke $\lambda = \left| \hat{z}_n - \hat{z}_m \right|_{n, m \in \mathbb{N}}$ mit $1 \leq m \leq 165$ und $1 \leq n \leq 165$ berechnet. Zu jeder Stützstellendifferenz wird das Programm POTSPE aufgerufen, in dem dann jeweils $\hat{v}_k^{\text{eff}} \left(\frac{\hat{z}_n - \hat{z}_m}{\sqrt{2}} \right)$ berechnet wird. Sind diese $2 \cdot 165^2 = 54\,450$ ($2 \cdot 165^2$, weil die Stützstellen auf der negativen Seite des Ursprungs berücksichtigt werden müssen) bereitgestellt, können $\hat{v}_{m_1 m_2}^{\text{Di}}$ und $\hat{v}_{m_1 m_2}^{\text{Ex}}$ mit Hilfe der Linearkombinationen (20), (21) berechnet werden. Dies würde dann $2 \cdot 54\,450 = 108\,900$ Werte ergeben. Man kann aber die Hälfte der Speicherplätze sparen, indem man die Symmetrieeigenschaft der Potentialmatrix ausnutzt. Der 54 450-fache Aufruf des Unterprogramms POTSPE benötigt

eine Rechenzeit von ungefähr 20 Minuten und beansprucht deshalb einen Großteil der Gesamtrechenzeit.

POT:

In diesem Unterprogramm, das sich von POTSPE von der Struktur her überhaupt nicht unterscheidet, werden die effektiven Potentiale V_m^{eff} an den Stützstellen $\hat{z}_n$ berechnet. Die Potentiale werden für $\hat{z} < 1$ nach den Formel (13), dargestellt als Polynomentwicklungen, berechnet. Für $\hat{z} > 1$ wird die Gleichung (12) nach der Gauß-Laguerre Quadraturmethode integriert, um V_m^{eff} zu ermitteln. Die Gründe dafür sind in der Arbeit von Überla [14] ausführlich beschrieben.

SOLVE:

Mit Hilfe dieses Unterprogramms wird die Hartree-Fock-Gleichung (24) mit den Startwerten der diagonalen Lagrangeparameter gelöst. Es werden also Wasserstoff-Startwellenfunktionen erzeugt.

QUADR:

Dieses Unterprogramm wird zur Normierung der Startwellenfunktion verwendet. In SCF wird es zum Normieren der iterierten Wellenfunktionen verwendet.

HL:

Hier wird der wechselwirkungsfreie Anteil des diagonalen Lagrange-Parameters berechnet. Die nicht wechselwirkungsfreien Anteile werden im Unterprogramm SCF berechnet.

SCF:

In SCF werden dann für die Startkernladungszahl die Wellenfunktion, die Einteilchenenergien, die Wechselwirkungsenergien und die Gesamtenergie durch eine Iteration berechnet. Das Unterprogramm SCF ist in der Arbeit von Pröschel [7] genau beschrieben.

Ist die Wellenfunktion berechnet, wird im Hauptprogramm Z vermindert und SCF erneut aufgerufen, wobei jetzt als Startwellenfunktion die Wellenfunktion der letzten Kernladungszahl genommen wird.

II. Elektromagnetische Übergänge für das H-Atom und He-Atom im extrem starken Magnetfeld.

1. Übergangswahrscheinlichkeit.

Ausgehend von der "Goldenen Regel" der Quantenmechanik

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle \psi_f | H_{fi} | \psi_i \rangle^2 \rho_k(E_a), \quad \text{wobei} \quad (25)$$

$$\rho_k(E_a) = \frac{V\omega^3}{8\pi^3\hbar c^3} d\Omega \quad \text{und}$$

$$H_{fi} = -\frac{e}{m} \underline{A}_{\text{Str}} \underline{p} + \frac{e^2}{2m} \underline{A}_{\text{Str}}^2 + 2\mu_B \underline{B}_{\text{Str}} \underline{\sigma} \quad \text{mit } \text{rot } \underline{A}_{\text{Str}} = \underline{B}_{\text{Str}},$$

die einen Übergang pro Zeiteinheit beschreibt, läßt sich die totale Übergangswahrscheinlichkeit W_{fi}^{tot} , wenn die Energien in Rydbergeinheiten und die Längen in der Einheit des Bohrschen Radius gemessen werden, nach Anwendung der Dipolnäherung und Integration über den Raumwinkel Ω in der dimensionslosen Form

$$W_{fi}^{\text{tot}} = \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\hbar\omega}{E_H} \right)^3 \frac{1}{3} \langle \psi_f | \frac{\underline{r}}{a_B} | \psi_i \rangle^2 \quad (26)$$

angeben (vgl. Wunner, Ruder [16]).

Dabei stellt $\frac{1}{\tau_0} = \frac{\alpha^5 mc^2}{2\hbar} = 8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ eine charakteristische atomare Zeitskala dar.

Die Dipolnäherung ist gut erfüllt, wenn die Lichtwellenlänge groß gegenüber der Ausdehnung des Atoms in der ρ, ϕ -Ebene ist. Sogar bei Übergängen mit großen Energieunterschieden, bei denen die Lichtwellenlänge verhältnismäßig klein ist, ist die Dipolnäherung noch gut erfüllt. Bei den im Rahmen dieser Arbeit berechneten Über-

gängen ist die größte Energiedifferenz ungefähr 470 eV für He beim Übergang $(0,0)(-1,1) \rightarrow (0,0)(-1,0)$ bei $\beta_Z = 1000$. Die Wellenlängen sind bei einem Energieunterschied von 500 eV von der Größenordnung $\frac{1}{20} a_B$.

Aufgrund der Skalengesetze besteht bei Fe beim gleichen Übergang und $\beta_Z = 1000$ bei einer Energiedifferenz von rund 110 000 eV der gleiche Größenordnungsunterschied.

2. Auswahlregeln für Übergänge im Wasserstoffatom.

Die Wasserstoffwellenfunktion ist eine Einteilchenwellenfunktion. Der Endzustand werde beschrieben durch:

$$\psi_f(\rho, \phi, z) = u_{\nu', m'}(\rho, \phi, z) = \phi_{m'}(\rho, \phi) \cdot f_{m', \nu'}(z).$$

Der Anfangszustand werde beschrieben durch:

$$\psi_i(\rho, \phi, z) = u_{\nu m}(\rho, \phi, z) = \phi_m(\rho, \phi) \cdot f_{m\nu}(z).$$

Ob ein Übergang möglich ist oder nicht, hängt allein davon ab, ob das Matrixelement $\langle \psi_f | \frac{r}{a_B} | \psi_i \rangle$ aus Formel (26) null oder verschieden von null ist.

Dies läßt sich unter Ausnutzung der Orthonormiertheitseigenschaft der Landauwellenfunktionen und der Normiertheit der longitudinalen Wellenfunktion f entscheiden. Das Matrixelement ist nur dann verschieden null, wenn

$$\begin{aligned} \text{a) } |m' - m| = |\Delta m| = 1 \quad \text{und } \nu', \nu \in \{\text{geraden Zahlen}\} \quad \text{oder} \\ \nu', \nu \in \{\text{ungeraden Zahlen}\} \end{aligned} \quad (27a)$$

$$\text{b) } |m' - m| = |\Delta m| = 0 \quad \text{und } \nu \in \{\text{geraden Zahlen}\} \text{ und } \nu \in \{\text{ungeraden Zahlen}\} \text{ oder umgekehrt ist.} \quad (27b)$$

Bei Übergängen mit $|\Delta m| = 1$ muß also die z-Parität erhalten bleiben, bei Übergängen mit $\Delta m = 0$ muß sich die z-Parität ändern.

Ist $|m' - m| = |\Delta m| = 1$, dann wird die z-Komponente des Matricelements 0; ist $\Delta m = 0$, dann wird die $\rho\phi$ -Komponente des Matricelements 0.

Die Integration der Landauwellenfunktionen nach ρ und ϕ ist analytisch durchführbar. Im einzelnen ergibt sich für das Matricelement, wenn die unabhängige Variable von f in Einheiten von $a_B = a_Z$ (bei H-Atom) angegeben wird, und der Operator

$$\frac{r}{a_B} = \frac{1}{2a_B} \cdot \begin{pmatrix} \rho(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ \rho/i(e^{i\phi} - e^{-i\phi}) \\ 2z \end{pmatrix} \quad \text{ist:}$$

$$\text{a) } |\Delta m| = 1$$

$$\begin{aligned} -(m - m') = 1 & \quad \langle f'_{m', \nu}(\hat{z}) | f_{m\nu}(\hat{z}) \rangle \frac{\sqrt{-m}}{\sqrt{2\beta_Z}} \\ -(m' - m) = 1 & \quad \langle f'_{m', \nu}(\hat{z}) | f_{m\nu}(\hat{z}) \rangle \frac{\sqrt{1-m}}{\sqrt{2\beta_Z}} \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\text{b) } \Delta m = 0 \quad \langle f'_{m', \nu}(\hat{z}) | \hat{z} | f_{m\nu}(\hat{z}) \rangle \quad (28b)$$

In nachstehendem Bild 2 sind die möglichen Übergänge, die mit den Auswahlregeln (27) verträglich sind, schematisch dargestellt.

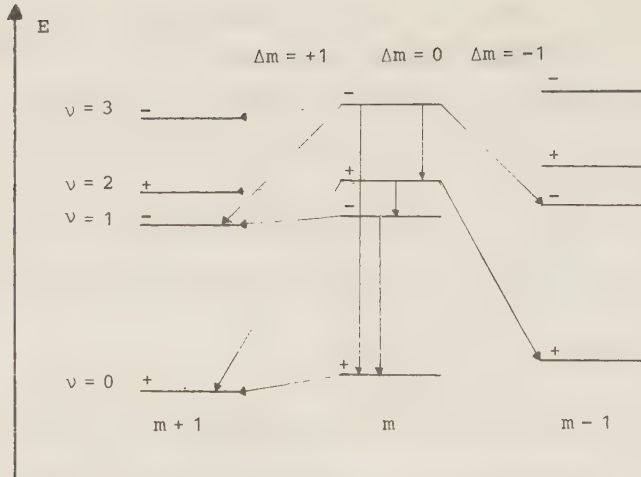


Bild 2: Erlaubte Übergänge innerhalb einer gegebenen m -Bande. Zustände mit gerader z -Parität sind mit +, solche mit ungerader mit - gekennzeichnet. Alle erlaubten Übergänge erhält man durch Wiederholung des Bildes für jeden Wert von m .
(Aus Wunner [19], Seite 24)

3. Auswahlregeln für Übergänge im Heliumatom bzw.

Zweielektronenatom.

Der Endzustand Ψ_f und der Anfangszustand Ψ_i der He-Wellenfunktion werde beschrieben durch:

$$\Psi_f^{\text{He}}(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} u_{m'_1 \nu'_1}(\rho_1, \phi_1, z_1) & u_{m'_1 \nu'_1}(\rho_2, \phi_2, z_2) \\ u_{m'_2 \nu'_2}(\rho_1, \phi_1, z_1) & u_{m'_2 \nu'_2}(\rho_2, \phi_2, z_2) \end{vmatrix}$$

$$\Psi_i^{\text{He}}(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} u_{m_1 \nu_1}(\rho_1, \phi_1, z_1) & u_{m_1 \nu_1}(\rho_2, \phi_2, z_2) \\ u_{m_2 \nu_2}(\rho_1, \phi_1, z_1) & u_{m_2 \nu_2}(\rho_2, \phi_2, z_2) \end{vmatrix}$$

Das Matrixelement läßt sich dann, wenn ρ_i, ϕ_i und $\hat{z}_i = \frac{z_i}{a_Z}$ mit (i) abgekürzt und die Längen wieder in Einheiten von a_Z gemessen werden, folgendermaßen darstellen:

$$\frac{1}{4} \left\langle \begin{vmatrix} \phi_{m'_1}^{*}(1) \cdot f_{m'_1 \nu'_1}^{*}(1) & \phi_{m'_1}^{*}(2) \cdot f_{m'_1 \nu'_1}^{*}(2) \\ \phi_{m'_2}^{*}(1) \cdot f_{m'_2 \nu'_2}^{*}(1) & \phi_{m'_2}^{*}(2) \cdot f_{m'_2 \nu'_2}^{*}(2) \end{vmatrix} \middle| \frac{r_1 + r_2}{a_Z} \middle| \begin{vmatrix} \phi_{m_1}(1) \cdot f_{m_1 \nu_1}(1) & \phi_{m_1}(2) \cdot f_{m_1 \nu_1}(2) \\ \phi_{m_2}(1) \cdot f_{m_2 \nu_2}(1) & \phi_{m_2}(2) \cdot f_{m_2 \nu_2}(2) \end{vmatrix} \right\rangle \quad (29)$$

Von den sich ergebenden 8 Summanden hat jeder die Form:

$$\frac{1}{a_Z} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{m'_1 \nu'_1}^{*}(k_1^{j'}) f_{m'_2 \nu'_2}^{*}(k_2^{j'}) \cdot \left(\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi_{m_1}^{*}(k_1^{j'}) \phi_{m_2}^{*}(k_2^{j'}) r_{k_{i \in \{1,2\}}}^{j'} \right. \\ \left. \phi_{m_1}(k_1^j) \phi_{m_2}(k_2^j) d\phi_1 d\phi_2 d\rho_1 d\rho_2 \right) \cdot f_{m_1 \nu_1}(k_1^j) f_{m_2 \nu_2}(k_2^j) d\hat{z}_1 d\hat{z}_2. \quad (30)$$

(k_1^j, k_2^j) ist die j -te Permutation der $2!$ Permutationen der Koordinatenindices 1 und 2.

Ein derartiger Summand ergibt nur dann einen Wert verschieden null, wenn folgende Bedingungen a) und b) erfüllt sind:

- a) Ist $|\Delta M| = |M' - M| = 1$ mit $M' = m'_1 + m'_2$ und $M = m_1 + m_2$, dann ist das Integral über ρ und ϕ dann von null verschieden, wenn auf beiden Seiten der Operator $\frac{r_{k_1^j}}{a_z}$ auf die Landauwellenfunktionen wirkt, bei denen sich die Quantenzahl um 1 ändert und bei denen auf die $\frac{r_{k_1^j}}{a_z}$ nicht wirkt, übereinstimmt. Man erhält bei analytischer Integration nach ρ und ϕ in diesem Fall:

$$\begin{aligned} m_1 = m'_1 \quad - \quad (m_2 - m'_2) = 1 & \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 1/i \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \sqrt{\frac{-m_2}{4\beta_z}} \\ m_1 = m'_1 \quad - \quad (m'_2 - m_2) = 1 & \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 1/i \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \sqrt{\frac{1-m_2}{4\beta_z}} \end{aligned} \quad (31a)$$

Die von null verschiedenen Integrale nach ρ und ϕ ergeben immer den angegebenen, gleichen Spaltenvektor (31a). Die Indices 1 und 2 sind vertauschbar. Die Integration nach $\hat{z}_1$ und $\hat{z}_2$, die numerisch durchgeführt werden muß, ergibt für $|\Delta M| = 1$ dann verschieden null, wenn die z -Parität auf beiden Seiten erhalten bleibt. Es muß also das Produkt aus den longitudinalen Wellenfunktionen auf beiden Seiten

entweder eine antisymmetrische oder eine symmetrische Funktion sein. Stimmen von m'_1 , m'_2 , m_1 und m_2 drei Zahlen überein, und sind die ν -Quantenzahlen alle gerade oder ungerade, dann sind von den 8 Summanden (30) 4 verschieden null, in allen anderen Fällen sind nur 2 verschieden null.

- b) Ist $\Delta M = |M - M'| = 0$ und $m_1 = m'_1$ und $m_2 = m'_2$, dann ergibt die analytische Integration über die Landauwellenfunktionen

$$\frac{z_1}{a_z} \quad \text{oder} \quad \frac{z_2}{a_z} \quad (31b)$$

Die ρ - und die ϕ -Komponente sind immer 0.

Die Integration nach $\hat{z}_1$ und $\hat{z}_2$ ist für $\Delta M = 0$ verschieden null, wenn sich die z -Parität ändert, d.h. wenn auf der linken Seite das Produkt aus den longitudinalen Wellenfunktionen antisymmetrisch und auf der rechten Seite symmetrisch oder umgekehrt ist. In aller Kürze können die Auswahlregeln - dafür allerdings weniger anschaulich - folgendermaßen dargestellt werden. Ein Übergang ist möglich, wenn gilt:

$$0 \leq |M - M'| \leq 1 \wedge ((1) \vee (2) \vee (3) \vee (4))$$

$$(1) \quad |m'_1 - m_1| \leq 1 \wedge m'_2 = m_2 \wedge EV(\nu_2, \nu'_2, 1) \wedge EV(\nu_1, \nu'_1, |M' - M|)$$

$$(2) \quad |m'_2 - m_2| \leq 1 \wedge m'_1 = m_1 \wedge EV(\nu_2, \nu'_2, |M' - M|) \wedge EV(\nu_1, \nu'_1, 1)$$

$$(3) \quad |m'_2 - m_1| \leq 1 \wedge m'_1 = m_2 \wedge EV(\nu_2, \nu'_1, 1) \wedge EV(\nu_1, \nu'_2, |M' - M|)$$

$$(4) \quad |m'_1 - m_2| \leq 1 \wedge m'_2 = m_1 \wedge EV(\nu_1, \nu'_2, 1) \wedge EV(\nu_2, \nu'_1, |M' - M|)$$

Die logische Funktion $EV(A,B,C)$ ist wahr, wenn $A+B+C+1$ gerade ist und falsch, wenn $A+B+C+1$ ungerade ist. Sie repräsentiert die z-Paritätserhaltungsauswahlregeln.

4. Skalengesetze für die Dipolstärke, Oszillatorstärke und Übergangswahrscheinlichkeit.

Die totale Übergangswahrscheinlichkeit W_{fi}^{tot} für das H-Atom wird in der Einheit der charakteristischen atomaren Zeitskala $\frac{1}{\tau_0} = 8 \cdot 10^9 s^{-1}$ gemessen.

Um diese nützliche Einheit auf die Übergangswahrscheinlichkeit bei Atomen mit zwei Elektronen und beliebiger Kernladungszahl anwenden zu können, muß unter Ausnutzung der Skalengesetze für die Energien und Längen das Skalengesetz für die Wellenfunktion abgeleitet werden. Daraus folgen dann unmittelbar die Skalengesetze für die Übergangswahrscheinlichkeit, die Dipolstärke und die Intensität.

Die Skalengesetze für die Längen und die Energien, wobei das Magnetfeld mitskaliert wird, lauten (Wunner 1981):

$$\underline{r}_H = Z \underline{r}$$

$$E(Z,B) = Z^2 E_H (Z=1, B/Z^2)$$

$\Psi_{Z=1, B/Z^2}(\underline{r})$ sei die Wasserstoffwellenfunktion und

$\Psi_{Z,B}(\underline{r})$ die Wellenfunktion des $(Z-1)$ -fach ionisierten

Atoms mit der Kernladungszahl Z bei der Magnetfeldstärke B . Weil die Wellenfunktionen von gebundenen Teilchen quadratisch integrierbar und normiert sind, muß gelten:

$$\int \Psi_{Z=1, B/Z^2}^* (\underline{r}_H) \cdot \Psi_{Z=1, B/Z^2} (\underline{r}_H) d^3 \underline{r}_H =$$

$$= Z^{3/2} \Psi_{Z=1, B/Z^2}^* (Z\underline{r}) \cdot Z^{3/2} \Psi_{Z=1, B/Z^2} (Z\underline{r}) d^3 \underline{r}$$

Deshalb ergibt sich als Skalengesetz für die Wellenfunktion:

$$\Psi_{Z, B} (\underline{r}) = Z^{3/2} \Psi_{Z=1, B/Z^2} (Z\underline{r}) = Z^{3/2} \Psi_{Z=1, B/Z^2} (\underline{r}_H) \quad (34)$$

Für das Matrixelement folgt dann:

$$\langle \Psi_{f, Z, B} | \underline{r} | \Psi_{i, Z, B} \rangle = Z^{-1} \langle \Psi_{f, Z=1, B/Z^2} | \underline{r} | \Psi_{i, Z=1, B/Z^2} \rangle d^3 \underline{r}_H \quad (35a)$$

Die Skalengesetze für die Dipolstärke d_{fi} , die Oszillatorstärke f_{fi} , die Intensität I_{fi} und die totale Übergangswahrscheinlichkeit W_{fi}^{tot} lauten, wenn man noch, um dimensionslos rechnen zu können, $\underline{r}/a_Z = \underline{r}_H/a_B$ und $(\hbar\omega/E_H) = Z^2 (\hbar\omega/E_Z)$ verwendet:

$$d_{fi, Z, B} = \langle \Psi_{f, Z, B} | \frac{\underline{r}}{a_Z} | \Psi_{i, Z, B} \rangle = Z^{-2} \langle \Psi_{f, Z=1, B/Z^2} | \frac{\underline{r}_H}{a_B} | \Psi_{i, Z=1, B/Z^2} \rangle =$$

$$= Z^{-2} d_{fi, Z=1, B/Z^2} \quad (35b)$$

$$f_{fi,Z,B} = Z^0 f_{fi,Z=1,B/Z^2} = Z^0 \left(\frac{\hbar\omega}{E_Z} \right) d_{fi,Z=1,B/Z^2} \quad (35c)$$

$$W_{fi,Z,B}^{\text{tot}} = Z^4 W_{fi,Z=1,B/Z^2}^{\text{tot}} = Z^4 \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\hbar\omega}{E_Z} \right)^3 d_{fi,Z=1,B/Z^2} \quad (35d)$$

$$I_{fi,Z,B} = Z^6 I_{fi,Z=1,B/Z^2} = Z^6 \left(\frac{\hbar\omega}{E_Z} \right)^4 d_{fi,Z=1,B/Z^2} \quad (35e)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten des Heliumatoms

werden also zum Beispiel in der Einheit $\frac{1}{\tau_0} \cdot 2^4 = 128 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ gemessen.

5. Numerische Berechnung der Dipolstärken, Oszillatorstärken, Übergangswahrscheinlichkeiten und Photonenenergien von Übergängen im extrem starken Magnetfeld.

Das Programm, dessen Ablaufschema in Bild 3 gezeigt wird, ist so erstellt, daß die Wellenfunktionen, die die dimensionslosen Hartree-Fock-Gleichungen (22) lösen, zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten in Einheiten von WZ ($1 \text{ WZ} = Z^4 \cdot 8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$) verwendet werden können.

Im Hauptprogramm UEWKT werden die longitudinalen Wellenfunktionen, die Anfangsgesamt- und Endgesamte-nergie in Einheiten von E_Z , β_Z und die Quantenzahlen des Anfangs- und Endzustands eingelesen.

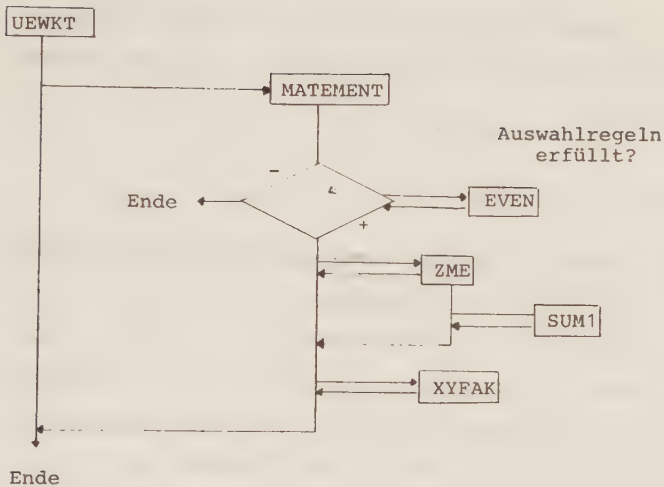


Bild 3: Ablaufschema des Programms

MATEMENT:

In diesem Unterprogramm werden zuerst die Auswahlregeln (32) abgefragt. Ist ein Übergang nach diesen Regeln nicht erlaubt, dann bricht das Programm ab. Sind die Auswahlregeln erfüllt, werden das Matrixelement, die Dipolstärke, die Oszillatorstärke, die Übergangswahrscheinlichkeit, die Intensität und die Photonenenergie des Übergangs berechnet. Dazu werden noch folgende Unterprogramme benötigt:

EVEN:

In diesem in den Auswahlregeln (32) aufgerufenen Unterprogramm ist die logische Funktion EV programmiert.

ZME:

In diesem Unterprogramm werden die Wellenfunktionen integriert. Hierbei muß nach ($|\Delta M|=1$)- und ($\Delta M=0$)-Übergängen unterschieden werden. Bei ($|\Delta M|=1$)-Übergängen wird nur über die Produkte der longitudinalen Wellenfunktionen integriert, bei ($\Delta M=0$)-Übergängen wird über das Produkt aus den Produkten der longitudinalen Wellenfunktionen und $\hat{z}$ integriert.

SUM1:

In SUM1 ist die Simpsonregel programmiert. Die Simpsonregel gilt aber nur für äquidistante Stützstellen. Deshalb muß im Bereich, in dem die Wellenfunktion für nicht-äquidistante Stützstellen tabelliert ist, eine Parametrisierung der unabhängigen Variablen $\hat{z}$, wie bereits in der Programmbeschreibung des Unterprogramms DATA auf Seite 26 erwähnt, vorgenommen werden.

XYFAK:

In XYFAK ist der absolute Betrag des Spaltenvektors (31a) programmiert. Für ($\Delta M=0$)-Übergänge wird anstelle

des absoluten Betrags des Spaltenvektors einfach die
Zahl 1 gesetzt.

III. Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden nun die Ergebnisse der Berechnungen dargestellt.

Zunächst werden die Gesamtenergien der berechneten Zweielektronensysteme (He , O^{6+} , Si^{12+} , Fe^{24+} , $Z \rightarrow \infty$) in tabellarischer Form zusammengefaßt; dann wird die besondere Problematik des Zustands $(-1,0)$ $(-2,0)$ beschrieben, und schließlich werden die Werte der Dipolstärken, Oszillatorstärken, Übergangswahrscheinlichkeiten und Photoenergien der berechneten elektromagnetischen Übergänge in Tabellen aufgeführt, graphisch dargestellt und erläutert.

1. Energien.

In den Tabellen 2, 3, 4 und 5 sind die absoluten Beträge der Gesamtenergien für die berechneten Zustände für He ($Z = 2$), O^{6+} ($Z = 8$), Si^{12+} ($Z = 14$), Fe^{24+} ($Z = 26$) und $Z \rightarrow \infty$ in Abhängigkeit von β_Z in der Einheit E_Z zusammengefaßt. Die zu jedem Z und β_Z gehörige Magnetfeldstärke kann in der Einheit Gauß nach der Formel $B = 4.7008 \cdot 10^9 \text{ G} \cdot \beta_Z \cdot Z^2$ berechnet werden.

Die hier durchgeführte nicht-relativistische Behandlung ist sicher dann zulässig, wenn der Bahnradius des Elektrons wesentlich größer ist als die de Broglie-Wellenlänge $\lambda_B = \frac{h}{mv}$ des Elektrons. Der Bahnradius wird

Zustand		β_Z							
		0.1	0.5	1	5	10	50	100	1000
(0,0)(0,1)	Z= 2	0.857046	1.57581	2.03045	3.59161	4.55604	7.74919	9.63701	18.8229
	8	0.987036	1.79324	2.29302	3.96174	4.96673	8.22612	10.1303	19.3380
	14	1.00625	1.82595	2.33299	4.02037	5.03326	8.30771	10.2165	19.4322
	26	1.01815	1.84626	2.35784	4.05702	5.07497	8.35930	10.2711	19.4925
	∞	1.0321	1.8335			5.1243	8.4208	10.336	19.565
Tab. 2									
(0,0)(0,2)	Z= 2	0.781692	1.46697	1.91157	3.46717	4.43617	7.64729	9.54338	18.7518
	8	0.877263	1.60660	2.070527	3.66845	4.65410	7.90020	9.80986	19.0577
	14	0.892091	1.62906	2.09650	3.70236	4.69117	7.94384	9.85604	19.1112
	26	0.901336	1.64316	2.11285	3.72380	4.71465	7.97156	9.88538	19.1453
	∞	0.9123	1.6232	2.1286	3.7503	4.7427	8.0047	9.9205	19.186
(0,0)(-1,0)	Z= 2	0.953063	1.86661	2.46751	4.58994	5.92058	10.3567	12.9904	25.8917
	8	1.08229	2.13460	2.83128	5.31106	6.94148	12.1351	15.2764	30.7740
	14	1.10084	2.17319	2.88375	5.41559	7.01564	12.3951	15.6115	31.4966
	26	1.11227	2.19697	2.91609	5.48008	7.10138	12.5557	15.8187	31.9442
	∞	1.1256	2.2226	2.9494	5.5579	7.2016	12.744	16.061	32.469
Tab. 3									
(0,0)(-1,1)	Z= 2	0.802193	1.51305	1.96775	3.53689	4.50668	7.71186	9.603907	18.7997
	8	0.910828	1.70188	2.19988	3.87799	4.89157	8.17289	10.0849	19.3086
	14	0.927189	1.73116	2.23655	3.93511	4.95802	8.25839	10.1765	19.4103
	26	0.937338	1.74943	2.25945	3.97110	5.00009	8.31324	10.2356	19.4768
	∞	0.9493	1.7343	2.2834	4.0173	5.0503	8.3793	10.307	19.558
(0,0)(-2,0)	Z= 2	0.867930	1.70493	2.25723	4.21610	5.4492	9.58064	12.0449	24.2007
	8	0.992261	1.96174	2.605298	4.90420	6.36090	11.2755	14.2244	28.8716
	14	1.01024	1.99904	2.65594	5.00485	6.49458	11.5255	14.5467	29.5682
	26	1.02132	2.02205	2.68720	5.06703	6.57720	11.6802	14.7463	30.0001
	∞	1.0343	2.0469	2.7183	5.1427	6.6739	11.861	14.980	30.507
Tab. 4									
(0,0)(-2,1)	Z= 2	0.794680	1.49370	1.94933	3.52423	4.49714	7.70802	9.60154	18.7993
	8	0.877842	1.65925	2.15521	3.83678	4.85532	8.15171	10.0698	19.3051
	14	0.891965	1.68566	2.18787	3.8890	4.91699	8.13352	10.1584	19.4059
	26	0.900734	1.70115	2.20829	3.92206	4.95604	8.28597	10.2155	19.4718
	∞	0.9111	1.7191	2.2297	3.9646	5.0026	8.3491	10.285	
(0,0)(-3,0)	Z= 2	0.835286	1.64178	2.17438	4.065338	5.25708	9.25471	11.6422	23.4435
	8	0.946977	1.87330	2.48874	4.69017	6.08711	10.8093	13.6484	27.7976
	14	0.963196	1.90706	2.53468	4.78192	6.20929	11.03945	13.9461	28.4488
	26	0.973202	1.92790	2.56304	4.83862	6.28483	11.1819	14.1306	28.8527
	∞	0.9849	1.9512	2.5971	4.9124	6.3733	11.349	14.347	29.327
Tab. 5									
(0,0)(-3,1)	Z= 2	0.775278	1.48292	1.93892	3.51706	4.491899	7.70651	9.60098	
	8	0.858090	1.63242	2.12642	3.80859	4.82990	8.13627	10.0587	
	14	0.87040	1.65568	2.15607	3.85703	4.88757	8.21463	10.144396	
	26	0.878432	1.67018	2.17459	3.88753	4.92404	8.26476	10.1995	
	∞	0.8876	1.6507	2.1935	3.9265	4.9675	8.3250	10.266	

Tabelle 2, 3, 4 und 5: Hartree-Fock Energiewerte in adiabatischer Näherung in Einheiten von E_Z für den Grundzustand und einige angeregte Zustände von Helium und heliumähnliche Ionen im extrem starken Magnetfeld.

gleich der Comptonwellenlänge $\lambda_C = \frac{h}{mc}$ des Elektrons bei der kritischen Magnetfeldstärke $B_q = 4.414 \cdot 10^{13}$ Gauß. Nähere Untersuchungen (Lindgren und Virtamo [21]) haben gezeigt, daß für Zustände im niedrigsten Landau-Niveau relativistische Korrekturen selbst für Magnetfelder $B > 10^{14}$ G noch vernachlässigbar klein sind. Der anschauliche Grund dafür ist, daß die Coulombbindungsenergien der Elektronen auch dann noch klein bleiben verglichen mit der Ruheenergie. Setzen wir als Feldstärke, von welcher ab relativistische Effekte zu berücksichtigen wären, $B_{rel} \approx 10^{15}$ G, so entspricht dies $\tilde{\beta}_{Z rel} = 10^{15} \text{ G} / 4.7 \cdot 10^9 \text{ G} \cdot Z^2 \approx 2 \cdot 10^5 / Z^2$. Somit haben wir für He $\tilde{\beta}_{Z rel} = 50\,000$, für O $\tilde{\beta}_{Z rel} = 3\,125$, für Si $\tilde{\beta}_Z = 1\,020$ und für Fe $\tilde{\beta}_{Z rel} = 296$. Allerdings sind dann auch für große Kernladungszahlen die bereits feldfrei auftretenden relativistischen Effekte zu berücksichtigen. Unter diesem Vorbehalt sind die Energietabellen zu verstehen.

Die Gesamtenergie eines HF-Zustandes ist nach (23) die Differenz aus der negativen Summe der Lagrangeparameter λ_{ii} und der positiven Wechselwirkungsenergie E_{12} zwischen den Elektronen. Ein Lagrangeparameter ist wieder die Summe aus der negativen Einteilchenenergie und der positiven Wechselwirkungsenergie. Für zunehmendes Z und festes β_Z steigen die absoluten Beträge der Gesamtenergie in Einheiten von E_Z an. Dies ist leicht damit zu erklären, daß für wachsendes Z die Wechselwirkungsenergien E_{12} (wie aus den Tabellen im

Anhang I ersichtlich), gegenüber den Einteilchenenergien beträchtlich abnehmen. Für $Z \rightarrow \infty$ entsprechen die Einteilchenenergien den Einteilchenenergien des H-Atoms in Einheiten von E_Z , wobei $E_{12} \rightarrow 0$ geht. Die Gesamtenergie ist dann nur noch die Summe der diagonalen Lagrangeparameter, die die Gleichung (24) erfüllen. Für den Anstieg der Energie für größer werdendes und festes Z ist die große Absenkung der Energie im stark-gebundenen Zustand verantwortlich.

Im Bild 4 sind die Gesamtenergien in Abhängigkeit von β_Z für $Z = 2$ und $Z = 26$ aufgetragen. Wegen der Übersichtlichkeit wurden die Graphen für $Z = 8$ und $Z = 14$ weggelassen.

Bei den einfach-stark-gebundenen Zuständen $(0,0)(-1,1)$, $(0,0)(-2,1)$, $(0,0)(-3,1)$, $(0,0)(0,1)$ und $(0,0)(0,2)$ sind die Gesamtenergien bei gleichen β_Z und Z fast gleich, weil die Einteilchenenergien der wasserstoffähnlichen Zustände $(-1,1)$, $(-2,1)$, $(-3,1)$, $(0,1)$ und $(0,2)$ gegenüber der Einteilchenenergie des stark-gebundenen Zustands $(0,0)$ sehr klein sind. (Vergleiche I.7.)

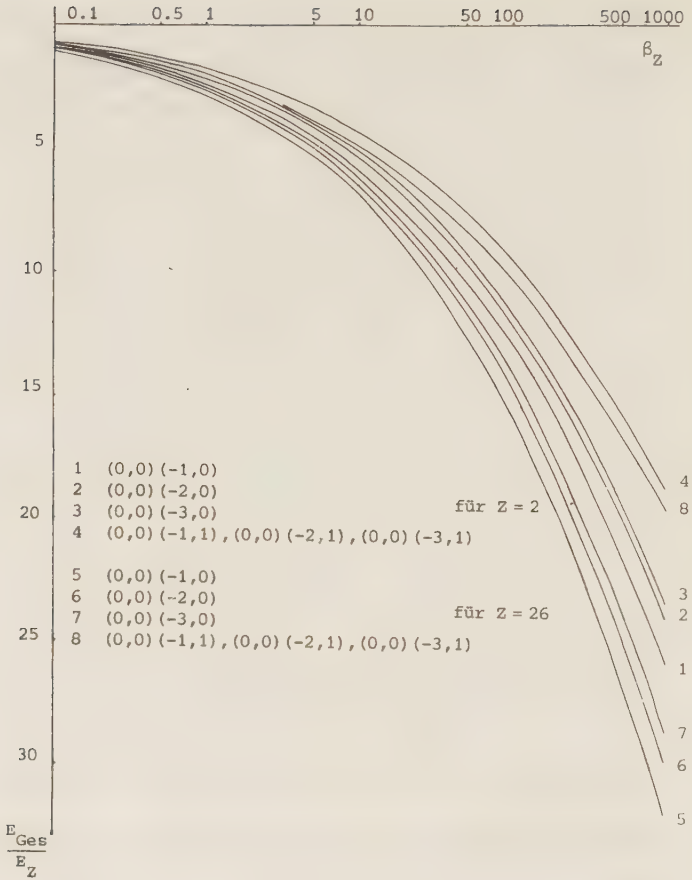


Bild 4: Gesamtenergie der angegebenen Zustände in Abhängigkeit von β_Z . Um die Übersichtlichkeit zu erhalten, wurden die Energien für $Z = 8$, $Z = 14$ und $Z = \infty$ nicht eingezeichnet. Die Zustände (0,0) (-1,1), (0,0) (-2,1), (0,0) (-3,1) liegen so dicht, daß sie durch einen Graphen dargestellt werden mußten.

2. Bemerkung zum Zustand $(-1,0)(-2,0)$.

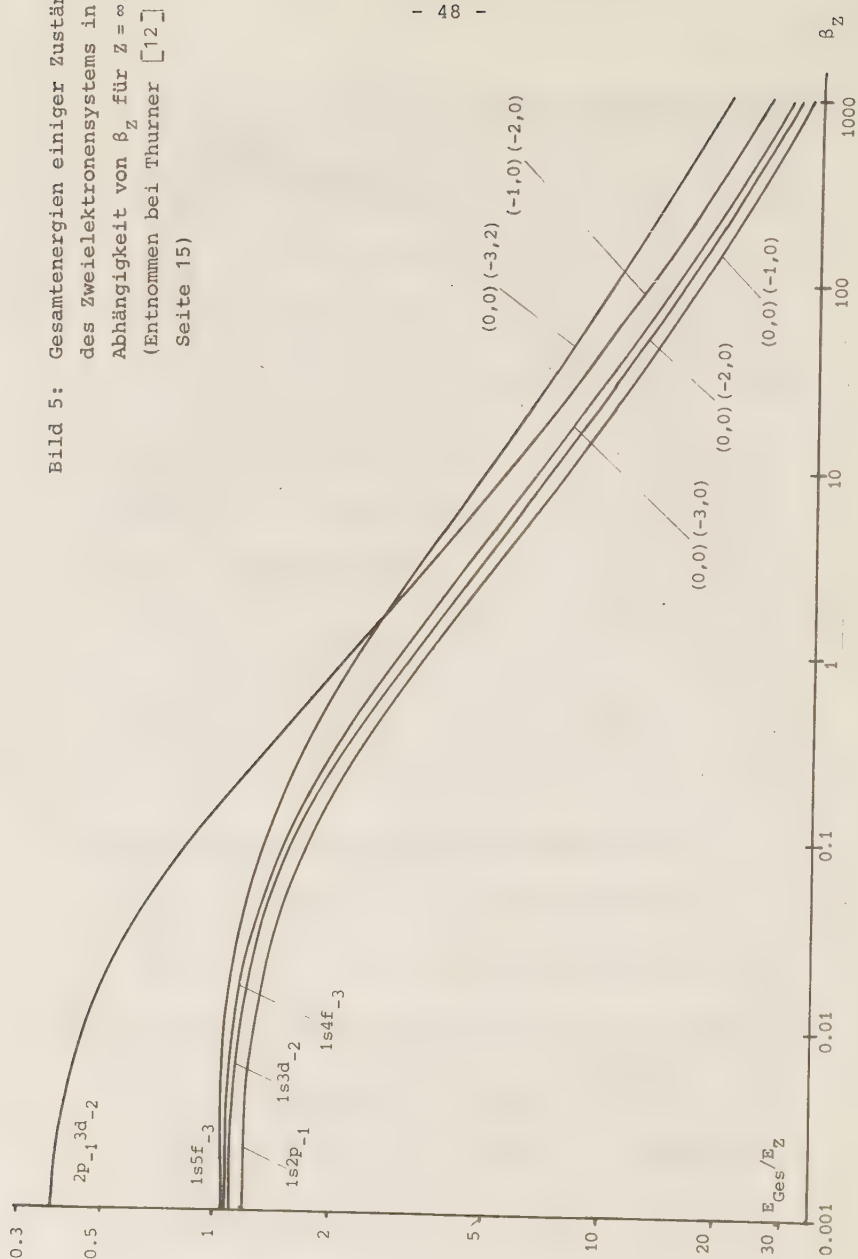
Ausführlich wird die Problematik dieses Zustandes bei Thurner [12] beschrieben; hier in diesem Abschnitt soll in aller Kürze erklärt werden, warum auf die Berechnung von Übergängen, die den doppelt-stark-gebundenen Zustand $(-1,0)(-2,0)$ als End- oder Anfangszustand haben, verzichtet wurde.

Die in dieser Arbeit berechneten Zustände lassen sich nach einer von Virtamo [11] gefundenen Vorschrift für die Zuordnung von Einelektronenzuständen ($Z = \infty$) des feldfreien Falles und denen im starken Magnetfeld folgenden feldfreien Zuständen zuordnen:

$$\begin{array}{ll}
 (0,0)(-1,0) \rightarrow 1s_0 2p_{-1} & (0,0)(-3,0) \rightarrow 1s_0 4f_{-3} \\
 (0,0)(-1,1) \rightarrow 1s_0 3d_{-1} & (0,0)(-3,1) \rightarrow 1s_0 5g_{-3} \\
 (0,0)(-2,0) \rightarrow 1s_0 3d_{-2} & (0,0)(0,1) \rightarrow 1s_0 2p_0 \\
 (0,0)(-2,1) \rightarrow 1s_0 4f_{-2} & (0,0)(0,2) \rightarrow 1s_0 2s_0
 \end{array}$$

Diese Zustände gehen auch nach Hinzunahme der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ($Z < \infty$) im Einklang mit der Wignerschen Non-Crossing-Rule stetig, ohne sich zu kreuzen, ineinander über. Anders ist dies beim Zustand $(-1,0)(-2,0)$, der für $Z = \infty$ dem Zustand $2p_{-1} 3d_{-2}$ zugeordnet werden muß. Mit zunehmendem β_Z wird die Energie von $(-1,0)(-2,0)$ immer tiefer und schneidet alle Zustände $(0,0)(-3,v)$ und bei $\beta_Z \approx 2$ den eingezeichneten Zustand $(0,0)(-3,2)$. (Siehe Bild (5)) Diese Kreuzung widerspricht im Fall $Z = \infty$ nicht der Wignerschen Non-

Bild 5: Gesamtenergien einiger Zustände
des Zweielektronensystems in
Abhängigkeit von β_Z für $Z = \infty$.
(Entnommen bei Thurner [12])
Seite 15)



Crossing-Rule, weil in diesem Fall die Zustände durch ihre Einelektronenquantenzahlen unterschieden werden können, aber für $Z < \infty$ bei eingeschalteter Elektron-Elektron-Wechselwirkung darf eine Kreuzung nicht auftreten.

Diese Schwierigkeit wird dadurch vermieden, daß man sich nicht kreuzende Mischzustände aus Zuständen gleicher z-Parität berechnet. Diese Mischzustände werden in der Nähe der Kreuzung in niedrigster Näherung als Linearkombinationen der Wellenfunktionen der beteiligten Zustände dargestellt, in diesem Fall z.B. $(-1,0)$ $(-2,0)$ und $(0,0)$ $(-3,2)$. Die Koeffizienten der Linearkombinationen sind die Komponenten der beiden linear unabhängigen auf 1 normierten Eigenvektoren der Matrix

$$\begin{pmatrix} E_1 & \Psi_1 H \Psi_2 \\ \Psi_2 H \Psi_1 & E_2 \end{pmatrix}.$$

E_1 , Ψ_1 , E_2 und Ψ_2 sind dabei die Gesamtenergien und Wellenfunktionen der Zustände $(-1,0)$ $(-2,0)$ und $(0,0)$ $(-3,2)$ und H ist der Hamiltonoperator. Die Gesamtenergien der beiden neuen Mischzustände sind die Eigenwerte der angegebenen Matrix.

Weil aber die Berechnung von Mischzuständen über die gesteckten Ziele dieser Arbeit hinausgehen würde, wurde auf die Berechnung des Zustandes $(-1,0)$ $(-2,0)$ verzichtet.

3. Ergebnisse für die Dipol-, Oszillatorstärke und die Übergangswahrscheinlichkeit.

In Tabelle 6, 7 und 8 sind die Werte für $(\Delta M = 0)$ -Übergänge zusammengestellt. Die Dipolstärken nehmen für wachsendes β_z um den Faktor $2/\beta_z$ bis $5/\beta_z$ ab. Dies rührt hauptsächlich daher, daß der atomare z-Dipol durch die stärkere Konzentration um den Ursprung für wachsendes β_z verkleinert wird. (Vergleiche Tab.: 2 bei Wunner [16]) und damit verbunden die Werte der Integrale $\langle f_{m, \nu+1} | z | f_{m, \nu} \rangle$ stark abnehmen. Der $(\Delta \nu = 0)$ -Überlapp $\langle f_{m', \nu} | f_{m, \nu} \rangle$ ist für $m' = m$ gleich 1 und für $m' \neq m$ fast gleich 1 und hat daher auf den Wert der Dipolstärke keinen Einfluß. Für den Anstieg der Energiedifferenzen (Photonenenergien) ist das starke Absenken der Energien der stark-gebundenen $(\nu = 0)$ -Zustände (siehe Tabellen im Anhang) verantwortlich. Bei den Oszillatorstärken - Produkt aus Dipolstärke und Photonenergie - ist eine Abnahme für wachsendes β_z zu verzeichnen, allerdings wirkt die von β_z abhängige, ansteigende Photonenergie der Abnahme der Dipolstärken etwas entgegen. Dagegen steigen die Übergangswahrscheinlichkeiten sogar beträchtlich an, weil hier die Energiedifferenzen in der 3. Potenz eingehen. Aus Bild 6 bis 11 sind die beschriebenen Zusammenhänge der Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten mit β_z ersichtlich.

β_Z

Z

	0.1	0.5	5	10	50	100	250	500	1000
2	d = 5.797 f = 0.8745 w = 0.006635 $\hbar\omega$ = 0.1509	2.130 0.7531 0.03138 0.3536	0.47092 0.4959 0.1833 1.053	0.28996 0.4100 0.2732 1.414	0.090177 0.2385 0.5561 2.645	0.054294 0.1839 0.7029 3.387	0.028052 0.1293 0.9159 4.610	0.017253 0.09916 1.091 5.747	0.010774 0.07638 1.280 7.092
8	d = 5.465 f = 0.9370 w = 0.009183 $\hbar\omega$ = 0.1715	2.0225 0.8752 0.05463 0.4327	0.50091 0.7178 0.4914 1.433	0.32821 0.6516 0.8559 1.985	0.12048 0.4774 2.498 3.962	0.077528 0.4025 3.616 5.191	0.027678 0.2540 7.128 9.176	0.027678 0.2540 7.128 9.176	0.017864 0.02048 8.975 11.47
14	d = 5.405 f = 0.9385 w = 0.009434 $\hbar\omega$ = 0.1737	1.997 0.8828 0.0570 0.4420	0.49738 0.7364 0.5380 1.480	0.32730 0.6735 0.9504 2.058	0.12193 0.5044 2.877 4.137	0.07906 0.4297 4.231 5.435	0.02871 0.2772 8.617 9.656	0.02871 0.2772 8.617 9.656	0.018643 0.2253 10.97 12.09
26	d = 5.368 f = 0.9390 w = 0.009577 $\hbar\omega$ = 0.1749	1.981 0.8868 0.05921 0.4476	0.4948 0.7452 0.5633 1.506	0.32636 0.6858 1.009 2.101	0.12258 0.5200 3.120 4.243	0.079831 0.4457 4.631 5.583	0.029286 0.2914 9.618 9.951	0.029286 0.2914 9.618 9.951	0.019090 0.2380 12.33 12.47
∞			d = 0.32499 f = 0.6992 w = 1.079 $\hbar\omega$ = 7.151	0.12314 0.5374 3.412 4.364		0.080579 0.4637 5.118 5.754	0.029905 0.3078 10.87 10.29	0.029905 0.3078 10.87 10.29	0.019580 0.2528 14.05 12.91

Tabelle 6: Dipolstärke d, Oszillatorstärke f, Übergangswahrscheinlichkeit w und Photonenenergie $\hbar\omega$ des ($\Delta M = 0$)-Übergangs $(0,0)(-1,1) \rightarrow (0,0)(-1,0)$ in Abhängigkeit von β_Z und der Kernladungszahl Z, berechnet mit Hartree-Fock-Wellenfunktionen unter Anwendung der adiabatischen Näherung.

d in Einheiten von $a_Z^2 = (\frac{\hbar}{am_C}/Z)^2$, w in Einheiten von $WZ = 8.02 \cdot 10^9 s^{-1} \cdot Z^4$ und $\hbar\omega$ in Einheiten von E_Z .

Z	β_Z							
	0.1	0.5	1	5	10	50	100	250
2	d = 10.94 f = 0.9104 w = 0.002103 κ_w = 0.08325	3.898 0.8233 0.01224 0.2112	2.4960 0.7685 0.02429 0.3079	0.86370 0.5976 0.09535 0.6919	0.53673 0.5110 0.1544 0.9521	0.16992 0.3182 0.3719 1.873	0.10238 0.2502 0.4978 2.443	0.052494 0.1786 0.6896 3.403
8	d = 0.329 f = 0.9530 w = 0.004159 κ_w = 0.1144	2.998 0.9070 0.02767 0.3025	1.94866 0.8771 0.05922 0.4501	0.72528 0.7742 0.2940 1.067	0.47404 0.7137 0.5393 1.506	0.17400 0.5435 1.768 3.124	0.11199 0.4653 2.677 4.155	0.062148 0.3670 4.267 5.906
14	d = 8.078 f = 0.9555 w = 0.004455 κ_w = 0.1183	2.908 0.9130 0.03000 0.3140	1.89111 0.8852 0.06464 0.4681	0.70702 0.7889 0.3276 1.116	0.46381 0.7317 0.6070 1.578	0.17250 0.5674 2.051 3.292	0.11183 0.4908 3.150 4.388	0.062688 0.3927 5.137 6.265
26	d = 7.934 f = 0.9568 w = 0.004638 κ_w = 0.1206	2.856 0.9163 0.03145 0.3209	1.85763 0.8896 0.06802 0.4789	0.69615 0.7971 0.3483 1.145	0.45759 0.7418 0.6499 1.621	0.17145 0.5819 2.235 3.394	0.11161 0.5057 3.460 4.531	0.062934 0.4070 5.676 6.468
∞				d = 0.45044 f = 0.7528 w = 0.7010 κ_w = 1.671	0.45044 0.7528 0.7010 1.671	0.17011 0.5975 2.457 3.512	0.11125 0.5224 3.839 4.696	

Tabelle 7: Siehe Tabelle 6, aber für den ($\Delta M = 0$) -Übergang $(0,0) \rightarrow (-2,1) \rightarrow (0,0) \rightarrow (-2,0)$.

Z	β_z						
	0.1	0.5	1	5	10	50	100
2	d = 15.62	5.450	3.475	1.206	0.7540	0.2424	0.1465
	f = 0.9374	0.8657	0.8183	0.6614	0.5770	0.3752	0.2991
	w = 0.1125(-2)	0.7283(-2)	0.1512(-1)	0.6629	0.1126	0.2998	0.4154
	$\hbar\omega$ = 0.6001(-1)	0.1589	0.2355	0.5483	0.7651	1.548	2.041
8	d = 10.83	3.838	2.481	0.9155	0.5976	0.2197	0.1416
	f = 0.9629	0.9246	0.8988	0.8071	0.7513	0.5872	0.5082
	w = 0.2536(-2)	0.1788(-1)	0.3933(-1)	0.2091	0.3958	1.398	2.183
	$\hbar\omega$ = 0.8889(-1)	0.2409	0.3623	0.8816	1.257	2.673	3.590
14	d = 10.42	3.696	2.391	0.8857	0.5800	0.2157	0.1400
	f = 0.9647	0.9291	0.9051	0.8192	0.7666	0.6094	0.5321
	w = 0.2755(-2)	0.1957(-1)	0.4325(-1)	0.2336	0.4464	1.621	2.564
	$\hbar\omega$ = 0.9256(-1)	0.2514	0.3786	0.9249	1.322	2.825	3.802
26	d = 10.19	3.615	2.339	0.8684	0.5696	0.2133	0.1389
	f = 0.9657	0.9316	0.9085	0.8260	0.7752	0.6221	0.5461
	w = 0.2891(-2)	0.2063(-1)	0.4570(-1)	0.2491	0.4785	1.765	2.813
	$\hbar\omega$ = 0.9477(-1)	0.2577	0.3884	0.9511	1.361	2.917	3.931
d = 0.5580 f = 0.7845 w = 0.5168 $\hbar\omega$ = 1.406							0.2104 0.6363 1.939 3.024

Tabelle 8: Siehe Tabelle 6, aber für den $(\Delta M = 0)$ -Übergang $(0,0) \leftarrow (-3,1) \rightarrow (0,0) \leftarrow (-3,0)$.

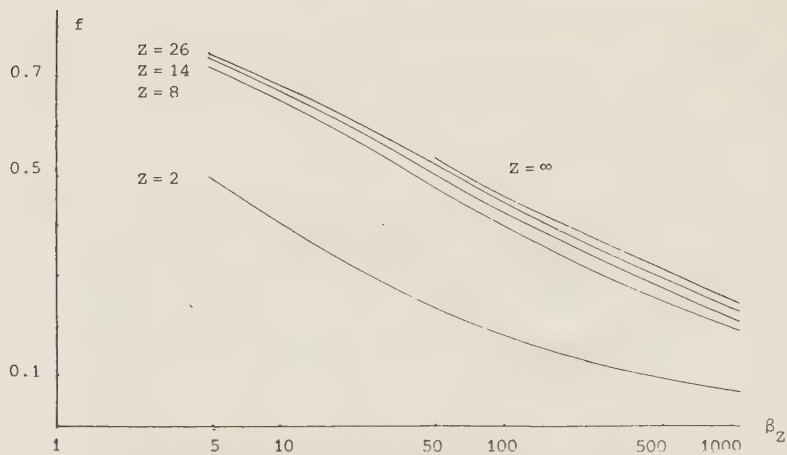


Bild 6: Oszillatorstärke für den $(\Delta M = 0)$ -Übergang $(0,0) (-1,1) \rightarrow (0,0) (-1,0)$ in Abhängigkeit von β_Z .

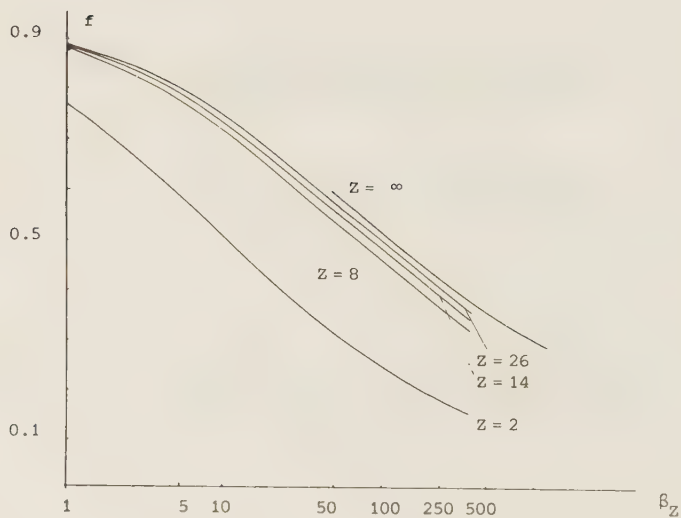


Bild 7: Siehe Bild 6, aber Übergang $(0,0) (-2,1) \rightarrow (0,0) (-2,0)$.

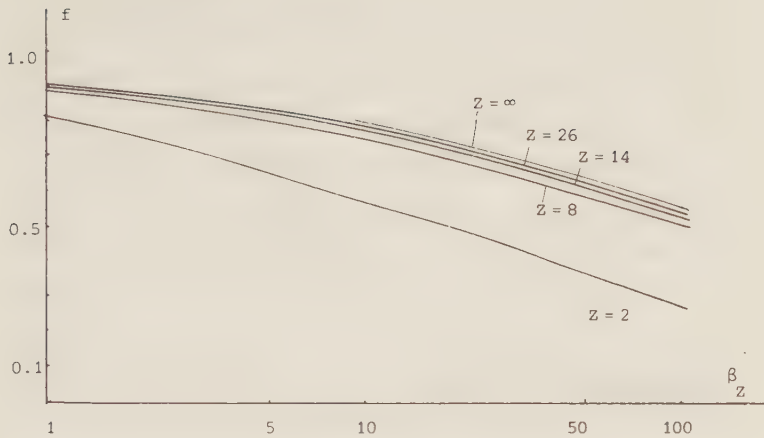
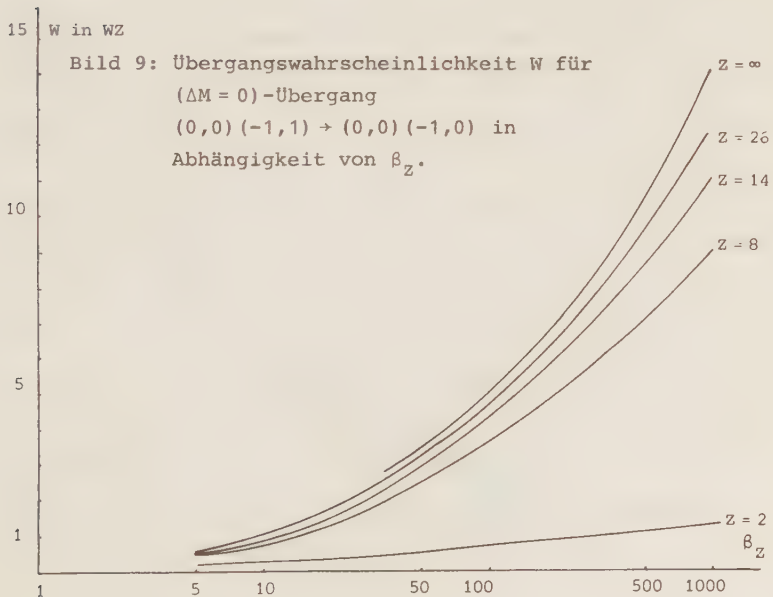


Bild 8: Siehe Bild 6, aber Übergang $(0,0) (-3,1) \rightarrow (0,0) (-3,0)$



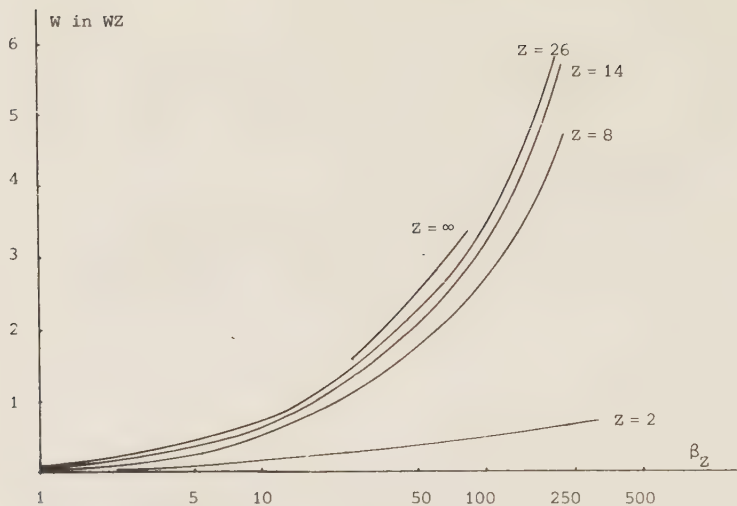


Bild 10: Siehe Bild 9, aber Übergang $(0,0) (-2,1) \rightarrow (0,0) (-2,0)$

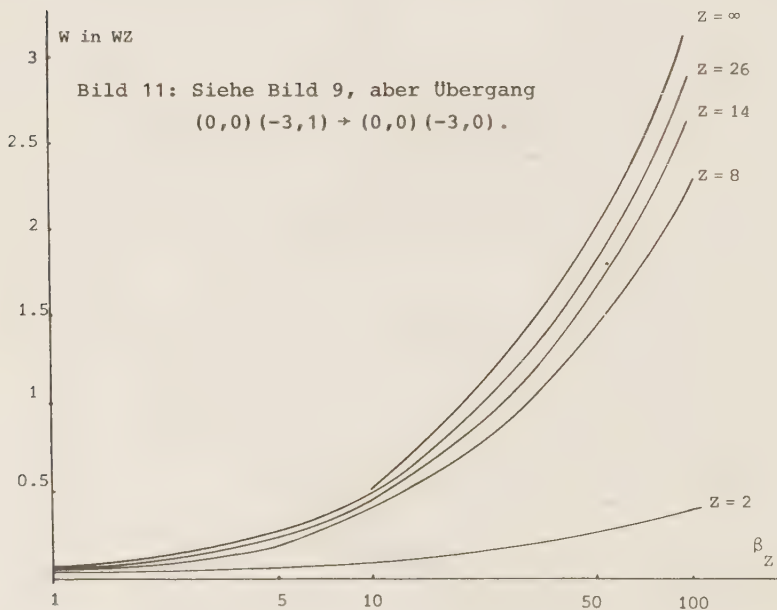


Bild 11: Siehe Bild 9, aber Übergang $(0,0) (-3,1) \rightarrow (0,0) (-3,0)$.

Für konstantes β_z und wachsende Kernladungszahl Z nehmen die Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten geringfügig zu. Dies ist auf den Anstieg der Photonenenergien zurückzuführen, die deshalb größer werden, weil für wachsendes Z die Gesamtenergien der doppelt-stark-gebundenen Zustände geringfügig stärker anwachsen als die der einfach-stark-gebundenen Zustände. Die Abhängigkeit der Oszillatorstärken von Z ist aus Bild 12 bis 14 zu ersehen.

Vergleicht man die Tabellen 6, 7 und 8, so stellt man fest, daß für gleiches β_z und Z die Dipolstärke und Oszillatorstärke für den Übergang $(0,0)(-3,1) \rightarrow (0,0)(-3,0)$ größer ist als für den Übergang $(0,0)(-2,1) \rightarrow (0,0)(-2,0)$ und diese wieder größer als für den Übergang $(0,0)(-1,1) \rightarrow (0,0)(-1,0)$; also für wachsendes m_2 und m'_2 anwächst. Verantwortlich hierfür ist wieder die Vergrößerung des atomaren z -Dipols für wachsendes m . Das Integral $\langle f_{m,v} | z | f_{m,v+1} \rangle$ steigt für wachsendes m . Bei den Übergangswahrscheinlichkeiten ist eine Abnahme zu verzeichnen, weil sich hier die 3. Potenzen der abnehmenden Photonenenergien stärker durchsetzen.

In Tabelle 9 und 10 sind die $(\Delta M = 1)$ -Übergänge zusammengestellt. Im Gegensatz zu den $(\Delta M = 0)$ -Übergängen sind hier die Dipolstärken sehr klein. Der Grund hierfür ist, daß bei den $(\Delta M = 1)$ -Übergängen der transversale atomare Dipol eine Rolle spielt, d.h. die Ausdehnung des Atoms senkrecht zum Magnetfeld wichtig ist, welche in Bezug auf die longitudinale Ausdehnung um ungefähr die gleiche

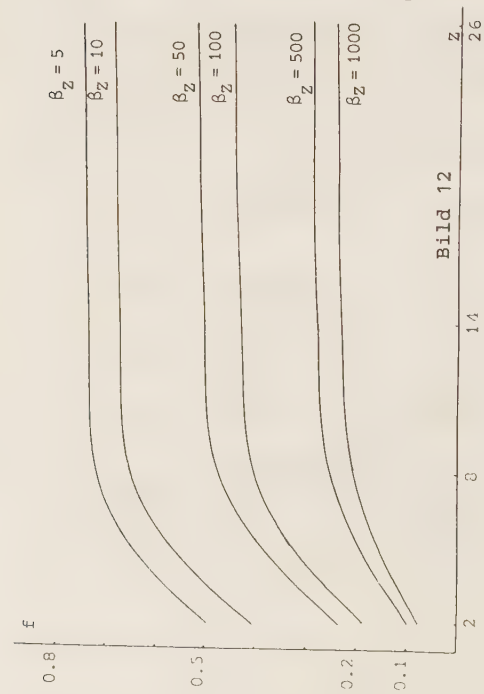


Bild 12

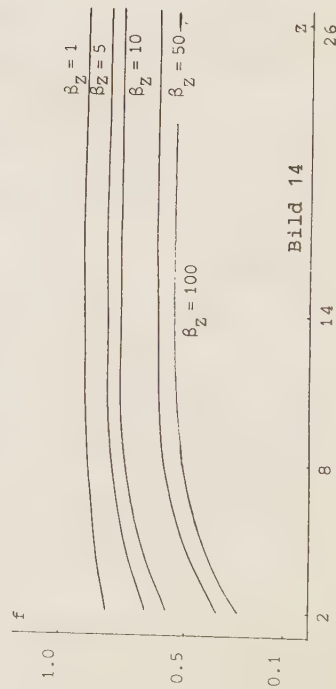


Bild 14

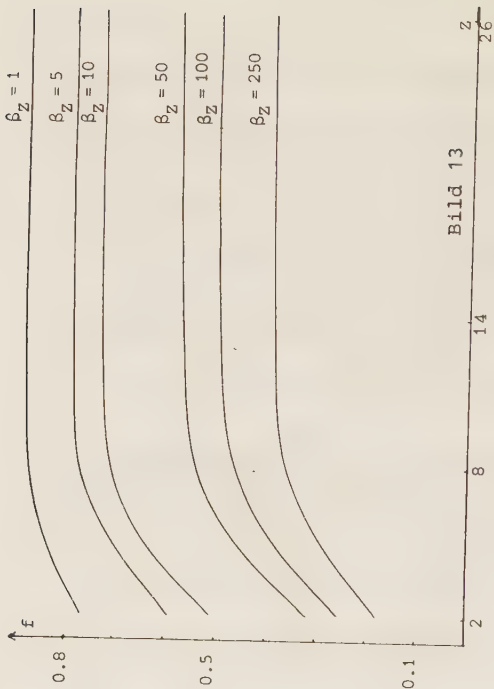


Bild 13

Oszillatorstärken in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z bei $(\Delta M = 0)$ -Übergängen.

Bild 12: Übergang $(0,0) \rightarrow (-1,1) \rightarrow (0,0) \rightarrow (-1,0)$.

Bild 13: Übergang $(0,0) \rightarrow (-2,1) \rightarrow (0,0) \rightarrow (-2,0)$.

Bild 14: Übergang $(0,0) \rightarrow (-3,1) \rightarrow (0,0) \rightarrow (-3,0)$.

Z	β_z									
	0.1	0.5	1	5	10	50	100	250	500	1000
2	d = 9.686	1.951	0.9781	0.1967	0.9652(-1)	0.1978(-1)	0.9902(-2)	0.3967(-2)	0.1985(-3)	0.9936(-3)
	f = 0.8245	0.3154	0.2057	0.7351(-1)	0.4643(-1)	0.1535(-1)	0.9362(-2)	0.4791(-2)	0.2852(-2)	0.1680(-2)
	w = 0.1992(-2)	0.2749(-2)	0.303(-2)	0.342(-2)	0.344(-2)	0.308(-2)	0.279(-2)	0.233(-2)	0.196(-2)	0.160(-2)
	$\eta_{\text{w}} = 0.3513(-1)$	0.1617	0.2103	0.3738	0.4713	0.7761	0.9455	1.2008	1.436	1.691
8	d = 9.833	1.974	0.9882	0.1982	0.9920(-1)	0.1988(-1)	0.9948(-2)	0.1982(-2)	0.1992(-2)	0.9967(-3)
	f = 0.8853	0.3411	0.2223	0.8064(-1)	0.5117(-1)	0.1709(-1)	0.1047(-1)	0.3211(-2)	0.1986(-2)	0.1986(-2)
	w = 0.2392(-2)	0.3398(-2)	0.380(-2)	0.445(-2)	0.454(-2)	0.421(-2)	0.386(-2)	0.278(-1)	0.229(-2)	0.229(-2)
	$\eta_{\text{w}} = 0.9003(-1)$	0.1729	0.2260	0.4069	0.5158	0.7431	1.052	1.612	1.902	1.902
14	d = 9.846	1.9755	0.9890	0.1983	0.9925(-1)	0.1989(-1)	0.9951(-2)	0.1993(-2)	0.1993(-2)	0.9969(-3)
	f = 0.8920	0.3440	0.2253	0.8145(-1)	0.5171(-1)	0.1729(-1)	0.1060(-1)	0.3255(-2)	0.1922(-2)	0.1922(-2)
	w = 0.2441(-2)	0.3478(-2)	0.390(-2)	0.458(-2)	0.468(-2)	0.436(-2)	0.400(-2)	0.289(-2)	0.238(-2)	0.238(-2)
	$\eta_{\text{w}} = 0.9060(-1)$	0.1742	0.2278	0.4107	0.5211	0.8696	1.065	1.533	1.928	1.928
26	d = 9.853	1.976	0.9894	0.1984	0.9928(-1)	0.1989(-1)	0.9953(-2)	0.1993(-2)	0.1993(-2)	0.9970(-3)
	f = 0.8960	0.3457	0.2265	0.8194(-1)	0.5204(-1)	0.1742(-1)	0.1067(-1)	0.3281(-2)	0.1938(-2)	0.1938(-2)
	w = 0.2470(-2)	0.3526(-2)	0.396(-2)	0.466(-2)	0.477(-2)	0.445(-2)	0.409(-2)	0.296(-2)	0.244(-2)	0.244(-2)
	$\eta_{\text{w}} = 0.9094(-1)$	0.1749	0.2289	0.4130	0.5242	0.8755	1.072	1.646	1.946	1.946
∞	d = 9.853	1.976	0.9894	0.1984	0.9928(-1)	0.1989(-1)	0.9953(-2)	0.1993(-2)	0.1993(-2)	0.9970(-3)
	f = 0.8960	0.3457	0.2265	0.8194(-1)	0.5204(-1)	0.1742(-1)	0.1067(-1)	0.3281(-2)	0.1938(-2)	0.1938(-2)
	w = 0.2470(-2)	0.3526(-2)	0.396(-2)	0.466(-2)	0.477(-2)	0.445(-2)	0.409(-2)	0.296(-2)	0.244(-2)	0.244(-2)
	$\eta_{\text{w}} = 0.9094(-1)$	0.1749	0.2289	0.4130	0.5242	0.8755	1.072	1.646	1.946	1.946

d = 0.9931(-1)
f = 0.5241(-1)
w = 0.487(-2)
 $\eta_{\text{w}} = 0.528$

Tabelle 2: Siehe Tabelle 6, aber für den ($\Delta M = 1$)-Übergang $(0,0)(-2,0) + (0,0)(-1,0)$.

Z	β_Z									
	0.1	0.5	1	5	10	50	100	500	1000	
2	d = 14.83	2.974	1.488	0.2982	0.1492	0.2988(-1)	0.1495(-1)	0.2992(-2)	0.1496(-2)	
	f = 0.4871	0.1878	0.1233	0.4495(-1)	0.2867(-1)	0.9739(-2)	0.6020(-2)	0.1895(-2)	0.1133(-2)	
	w = 0.1719(-3)	0.2496(-3)	0.2821(-3)	0.3403(-3)	0.3530(-3)	0.3449(-3)	0.3294(-3)	0.2535(-3)	0.2166(-3)	
	$\eta_{10} = 0.3264(-1)$	0.6315(-1)	0.8285(-1)	0.1507	0.1922	0.3259	0.4027	0.6335	0.7572	
8	d = 14.897	2.983	1.4925	0.29882	0.14948	0.29921(-1)	0.14965(-1)	0.29948(-2)	0.149772(-2)	
	f = 0.6746	0.2639	0.1739	0.6396(-1)	0.4093(-1)	0.1395(-1)	0.8620(-2)	0.2701(-2)	0.1608(-2)	
	w = 0.4611(-3)	0.6880(-3)	0.7976(-3)	0.9766(-3)	0.1023(-2)	0.1011(-2)	0.9532(-3)	0.7320(-3)	0.6184(-3)	
	$\eta_{10} = 0.4528(-1)$	0.8844(-1)	0.1165	0.2140	0.2738	0.4662	0.5760	0.9018	1.074	
14	d = 14.902	2.9840	1.4928	0.29887	0.14949	0.29924(-1)	0.14966(-1)	0.29950(-2)	0.149781(-2)	
	f = 0.7010	0.2745	0.1810	0.6663(-1)	0.4265(-1)	0.1456(-1)	0.9389(-2)	0.2816(-2)	0.1677(-2)	
	w = 0.5171(-3)	0.7740(-3)	0.8874(-3)	0.1104(-2)	0.1157(-2)	0.1146(-2)	0.1081(-2)	0.8295(-3)	0.7002(-3)	
	$\eta_{10} = 0.4704(-1)$	0.9198(-1)	0.1213	0.2229	0.2853	0.4861	0.6006	0.9401	1.119	
26	d = 14.905	2.9844	1.4929	0.29889	0.14951	0.29925(-1)	0.14967(-1)	0.29951(-2)	0.149785(-2)	
	f = 0.7173	0.2810	0.1854	0.6827(-1)	0.4371(-1)	0.1491(-1)	0.9216(-2)	0.2887(-2)	0.1719(-2)	
	w = 0.5537(-3)	0.8302(-3)	0.9526(-3)	0.1187(-2)	0.1245(-2)	0.1234(-2)	0.1165(-2)	0.8937(-3)	0.7541(-3)	
	$\eta_{10} = 0.4812(-1)$	0.9415(-1)	0.1242	0.2284	0.2924	0.4983	0.6158	0.9638	1.147	
d = 0.14952 f = 0.4495(-1) w = 0.1354(-2) $\eta_{10} = 0.3006$										
					0.29927(-1)	0.14968(-1)	0.29953(-2)	0.149797(-2)	0.1768(-2)	
					0.1534(-1)	0.9482(-2)	0.2970(-2)	0.1768(-2)	0.8207(-3)	
					0.1344(-2)	0.1268(-2)	0.9730(-3)			
					0.5126	0.6335				

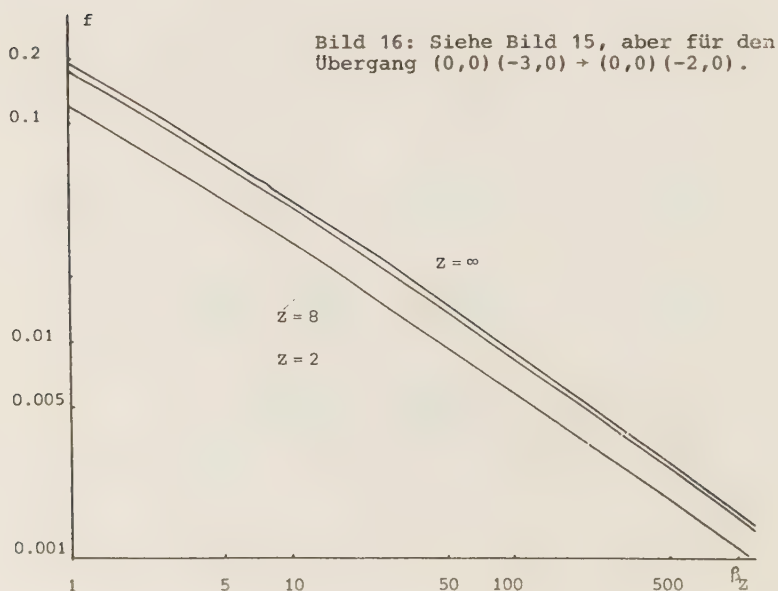
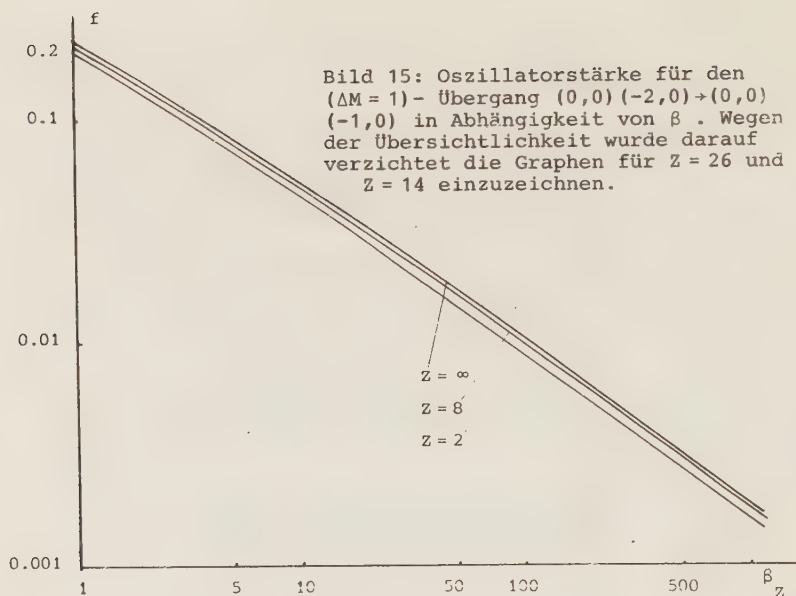
Tabelle 10: Siehe Tabelle 6, aber für den $(\Delta M = 1)$ -Übergang $(0,0)(-3,0) \rightarrow (0,0)(-2,0)$.

Größenordnung kleiner ist. Die Dipolstärken nehmen wegen (31a) für wachsendes β_z um den Faktor $1/\beta_z$ ab. Die Magnetfeldabhängigkeit ist schon deshalb allein durch den Spaltenvektor (31a) gegeben, weil der Überlapp $\langle f_{m,v} | f_{m+1,v} \rangle$ für $(\Delta v = 0)$ -Übergänge, die in diesem Fall vorliegen, wegen der Ähnlichkeit der effektiven Potentiale für m und $m+1$ fast gleich 1 ist und daher zum Wert des Matrixelements und der Dipolstärke fast keinen Beitrag leistet.

Im Vergleich zu $(\Delta M = 0)$ -Übergängen nehmen die Oszillatorstärken bei $(\Delta M = 1)$ -Übergängen viel stärker ab. Sie werden im Bereich von $\beta_z = 1$ bis $\beta_z = 1000$ um den Faktor 100 kleiner. Auch für die Übergangswahrscheinlichkeiten ist im Gegensatz zu $\Delta M = 0$, von der Ausnahme für kleine $\beta_z < 10$ abgesehen, eine Abnahme zu verzeichnen. Siehe Bild 15 bis 18.

Daß für konstantes β_z und wachsendes Z die Oszillatorstärken zunehmen, läßt sich mit der Zunahme der Photonenenergien auf analoge Weise wie bei den $(\Delta M = 0)$ -Übergängen erklären. Siehe Bild (19, 20). Auch, daß für gleiches β_z und Z beim Übergang $(0,0) (-3,0) \rightarrow (0,0) (-2,0)$ die Dipolstärken größer sind als beim Übergang $(0,0) (-2,0) \rightarrow (0,0) (-1,0)$ gilt das gleiche wie bei den $(\Delta M = 0)$ -Übergängen. Für die Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten ist es wegen der kleineren Photonenenergien beim Übergang $(0,0) (-3,0) \rightarrow (0,0) (-2,0)$ gerade umgekehrt.

In Tabelle 11 ist noch der $(\Delta M = 1)$ -Übergang $(0,0) (-1,1) \rightarrow (0,0) (0,1)$, allerdings nur für $Z = 2$ aufgelistet. Die $1/\beta_z$ Abnahme der Dipolstärke ist auch hier vorhanden. Die



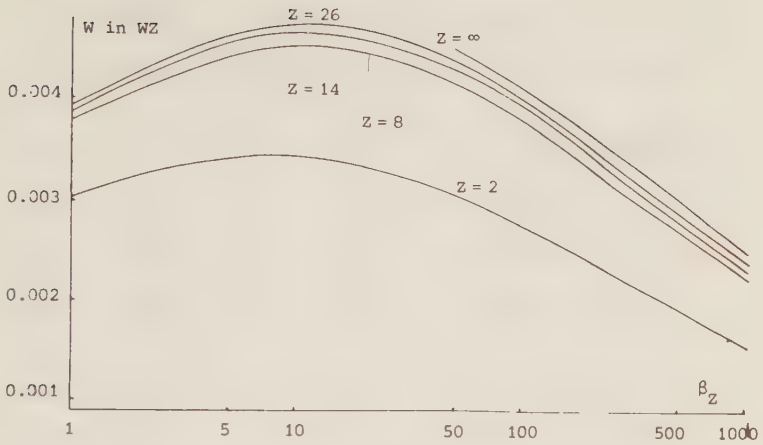


Bild 17: Übergangswahrscheinlichkeit W für den $(\Delta M = 1)$ -Übergang $(0,0) (-2,0) \rightarrow (0,0) (-1,0)$ in Abhängigkeit von β_Z .

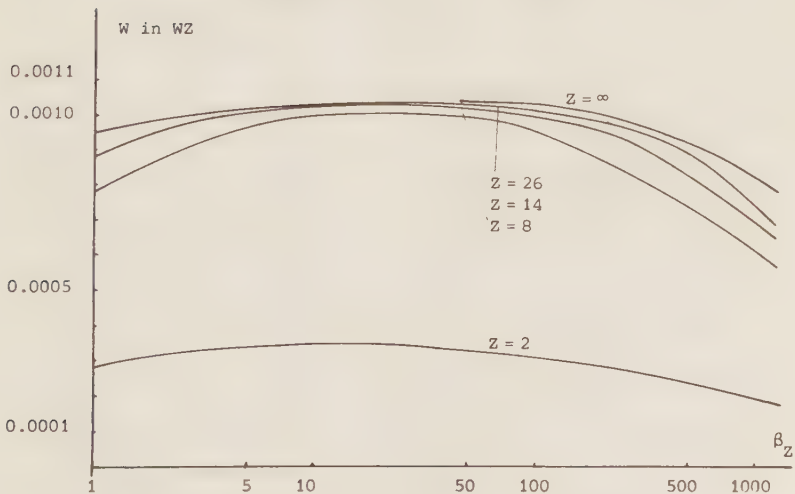


Bild 18: Siehe Bild 17, aber für den Übergang $(0,0) (-3,0) \rightarrow (0,0) (-2,0)$.

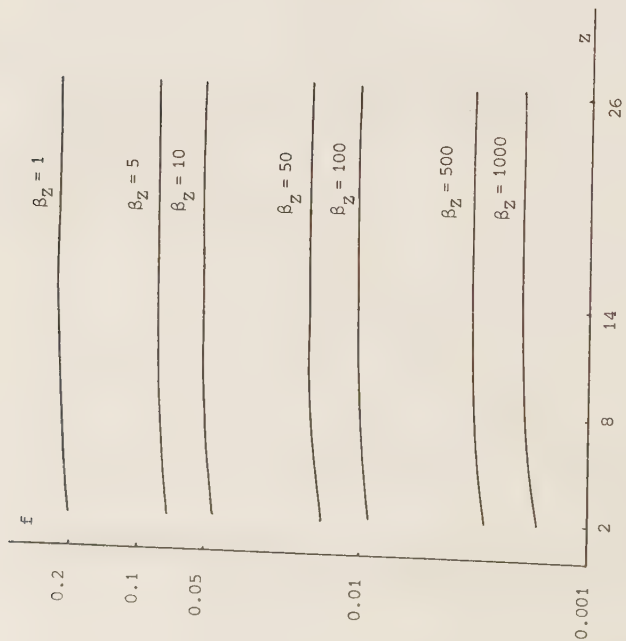


Bild 19:

$(\Delta M = 1)$ -Übergang $(0,0) (-2,0) \rightarrow (0,0) (-1,0)$.

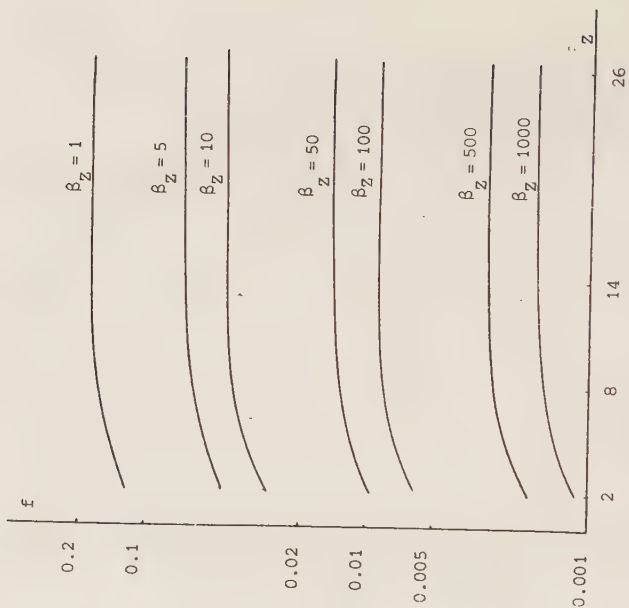


Bild 20:

$(\Delta M = 1)$ -Übergang $(0,0) (-3,0) \rightarrow (0,0) (-2,0)$.

Oszillatorstärken in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z bei $(\Delta M = 1)$ -Übergängen.

Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten sind aber wegen der winzigen Photonenenergien im Gegensatz zu den anderen Übergängen um einige Zehnerpotenzen kleiner.

β_Z	d_{fi}	f_{fi}	W_{fi} in WZ	Photonenenergie
10	0.48377(-1)	0.23882(-2)	0.1940(-5)	0.4937(-1)
50	0.98080(-2)	0.3661(-3)	0.1701(-6)	0.3733(-1)
100	0.49228(-2)	0.16297(-3)	0.5954(-7)	0.3311(-1)
250	0.19765(-2)	0.5634(-4)	0.1526(-7)	0.2850(-1)
500	0.99034(-3)	0.2541(-4)	0.5575(-8)	0.2566(-1)
1000	0.49599(-3)	0.1153(-4)	0.2079(-8)	0.2325(-1)

Tabelle 11: Dipolstärke d_{fi} , Oszillatorstärke f_{fi} und Übergangswahrscheinlichkeit W_{fi} für den Übergang: $(0,0)(-1,1) \rightarrow (0,0)(0,1)$ mit $\Delta M = 1$ von Helium $Z = 2$.

Beim $(\Delta M = -1)$ -Übergang $(0,0)(0,2) \rightarrow (0,0)(-1,0)$ sind die Dipolstärken um 2 bis 3 Zehnerpotenzen kleiner als bei den Übergängen $(0,0)(-3,0) \rightarrow (0,0)(-2,0)$ und $(0,0)(-2,0) \rightarrow (0,0)(-1,0)$. Dies liegt daran, daß die $(\Delta v \neq 0)$ -Überlapps $\langle f_{02} | f_{-10} \rangle$ und $\langle f_{02} | f_{00} \rangle$ hier in der Größenordnung 10^{-2} bis 10^{-3} sind. Für die Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten gilt das bei den $(\Delta M = 1)$ -Übergängen Gesagte entsprechend. In Tabelle 12 und in Bild 21 bis 23 sind die Ergebnisse dieses Übergangs dargestellt.

Z	β_Z									
	0.1	0.5	1	5	10	50	100	250	500	1000
2	d = 0.1769	0.2087(-1)	0.7976(-2)	0.8081(-3)	0.2980(-3)	0.2924(-4)	0.1077(-4)	0.2883(-5)	0.1066(-5)	0.3954(-6)
	f = 0.3032(-1)	0.8342(-2)	0.4434(-2)	0.9073(-3)	0.4423(-3)	0.7922(-4)	0.3712(-4)	0.1345(-4)	0.6183(-5)	0.2823(-5)
	w = 0.2968(-3)	0.4441(-3)	0.457(-3)	0.361(-3)	0.325(-3)	0.194(-3)	0.147(-3)	0.976(-4)	0.693(-4)	0.480(-4)
	$\eta_w = 0.1714$	0.3996	0.5559	1.123	1.484	2.709	3.447	4.665	5.798	7.140
8	d = 0.1987	0.2386(-1)	0.9199(-2)	0.9293(-3)	0.3374(-3)	0.3109(-4)	0.1108(-4)	0.1014(-5)	0.1014(-5)	0.3646(-6)
	f = 0.4075(-1)	0.1260(-1)	0.6998(-2)	0.1526(-2)	0.7499(-3)	0.1317(-3)	0.6055(-4)	0.9569(-5)	0.9569(-5)	0.4271(-5)
	w = 0.5709(-3)	0.1171(-2)	0.135(-2)	0.137(-2)	0.124(-2)	0.787(-3)	0.603(-3)	0.284(-3)	0.284(-3)	0.195(-3)
	$\eta_w = 0.2050$	0.5280	0.7608	1.643	2.223	4.235	5.467	9.437	9.437	11.72
14	d = 0.2001	0.2395(-1)	0.9230(-2)	0.9305(-3)	0.3372(-3)	0.3085(-4)	0.1095(-4)	0.9927(-6)	0.9927(-6)	0.3555(-6)
	f = 0.4177(-1)	0.1303(-1)	0.7266(-2)	0.1594(-2)	0.7837(-3)	0.1373(-3)	0.6301(-4)	0.9893(-5)	0.9893(-5)	0.4403(-5)
	w = 0.6068(-3)	0.1286(-2)	0.150(-2)	0.156(-2)	0.141(-2)	0.907(-3)	0.696(-3)	0.328(-3)	0.328(-3)	0.225(-3)
	$\eta_w = 0.2087$	0.5441	0.7872	1.713	2.324	4.451	5.755	9.966	9.966	12.39
26	d = 0.2008	0.2399(-1)	0.9240(-2)	0.9301(-3)	0.3367(-3)	0.3068(-4)	0.1086(-4)	0.9792(-6)	0.9792(-6)	0.3499(-6)
	f = 0.4236(-1)	0.1328(-1)	0.7422(-2)	0.1633(-2)	0.8035(-3)	0.1406(-3)	0.6443(-4)	0.1008(-4)	0.1008(-4)	0.4478(-5)
	w = 0.6282(-3)	0.1358(-2)	0.160(-2)	0.168(-2)	0.153(-2)	0.985(-3)	0.756(-3)	0.356(-3)	0.356(-3)	0.245(-3)
	$\eta_w = 0.2109$	0.5538	0.8032	1.756	2.387	4.584	5.933	10.29	10.29	12.80
∞	d = 0.2008	0.2399(-1)	0.9240(-2)	0.9301(-3)	0.3367(-3)	0.3068(-4)	0.1086(-4)	0.9792(-6)	0.9792(-6)	0.3499(-6)
	f = 0.4236(-1)	0.1328(-1)	0.7422(-2)	0.1633(-2)	0.8035(-3)	0.1406(-3)	0.6443(-4)	0.1008(-4)	0.1008(-4)	0.4478(-5)
	w = 0.6282(-3)	0.1358(-2)	0.160(-2)	0.168(-2)	0.153(-2)	0.985(-3)	0.756(-3)	0.356(-3)	0.356(-3)	0.245(-3)
	$\eta_w = 0.2109$	0.5538	0.8032	1.756	2.387	4.584	5.933	10.29	10.29	12.80

Tabelle 12: Siehe Tabelle 6, aber für den $(\Delta M = -1)$ -Übergang $(0,0)(0,2) \rightarrow (0,0)(-1,0)$.

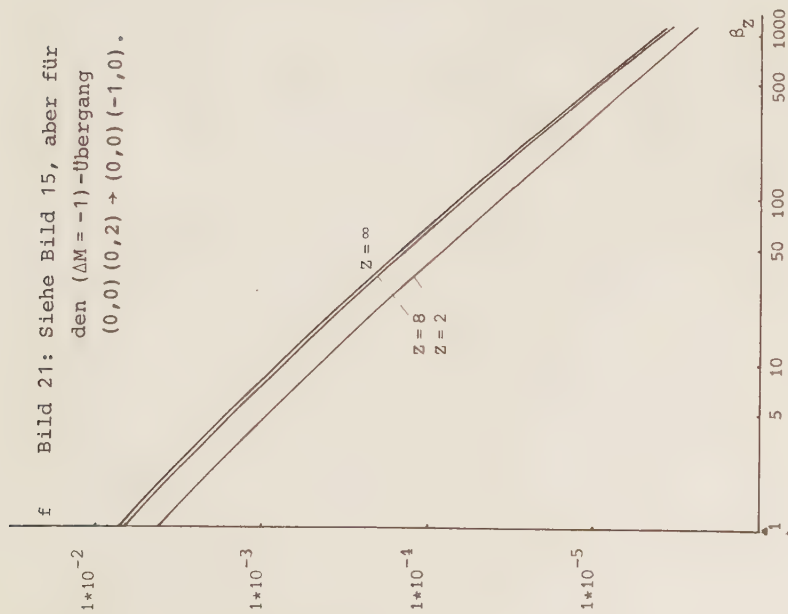
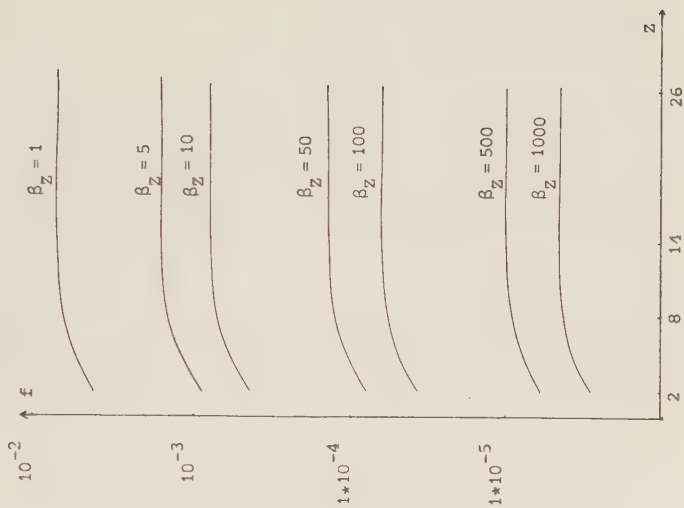


Bild 22: Siehe Bild 19, aber für den $(\Delta M = -1)$ -Übergang $(0,0) (0,2) \rightarrow (0,0) (-1,0)$.



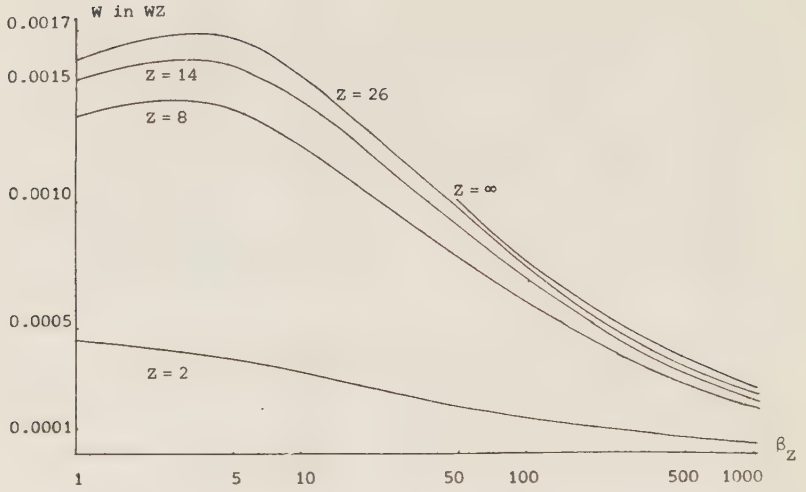


Bild 23: Übergangswahrscheinlichkeit W für den
 $(\Delta M = -1)$ -Übergang $(0,0) (0,2) \rightarrow (0,0) (-1,0)$
in Abhängigkeit von β_Z .

4. Niveauschemas für das Helium-Atom

Die Bilder 24 bis 33 zeigen zur Veranschaulichung die Energieniveaus und Übergänge im Helium für die hier immer wieder verwendeten β_Z -Werte von 0,1 bis 1000. Von dem an jedem Übergangspfeil stehenden Zahlentripel gibt die obere Zahl die Oszillatorstärke, die mittlere die Übergangswahrscheinlichkeit in der Einheit WZ und die untere die Wellenlänge in nm (10^{-9} m) an.

Lücken in den Eintragungen rühren daher, daß manche Wellenfunktionen wegen Zeitmangels bis jetzt noch nicht berechnet wurden.

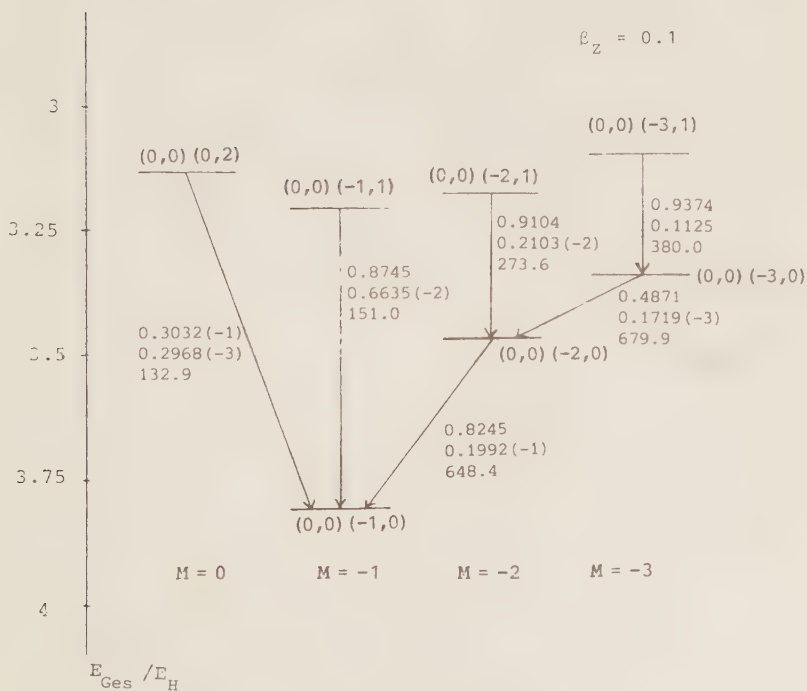


Bild 24

$$\beta_z = 0.5$$

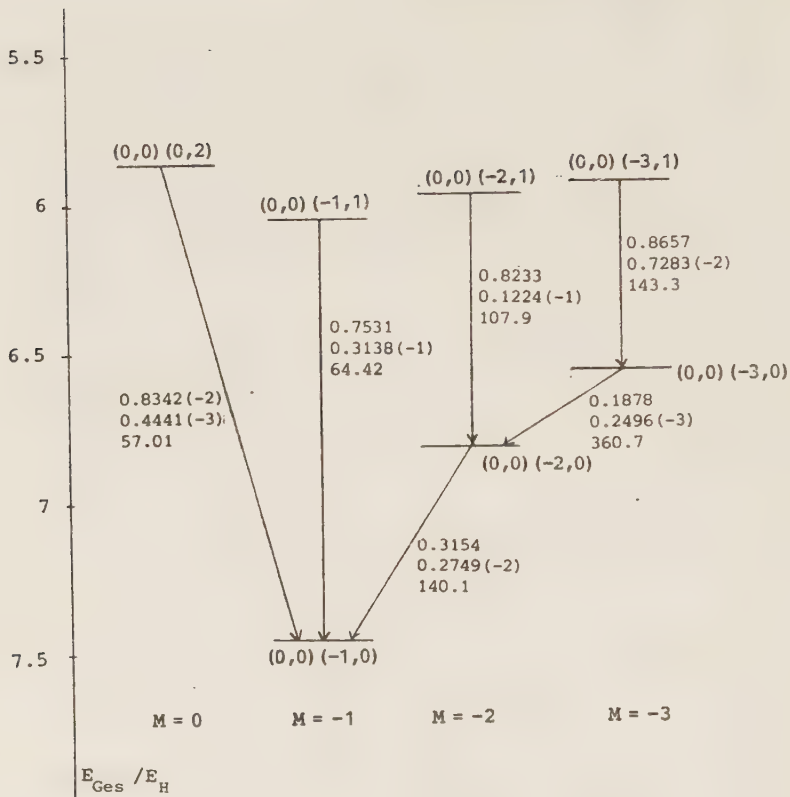


Bild 25

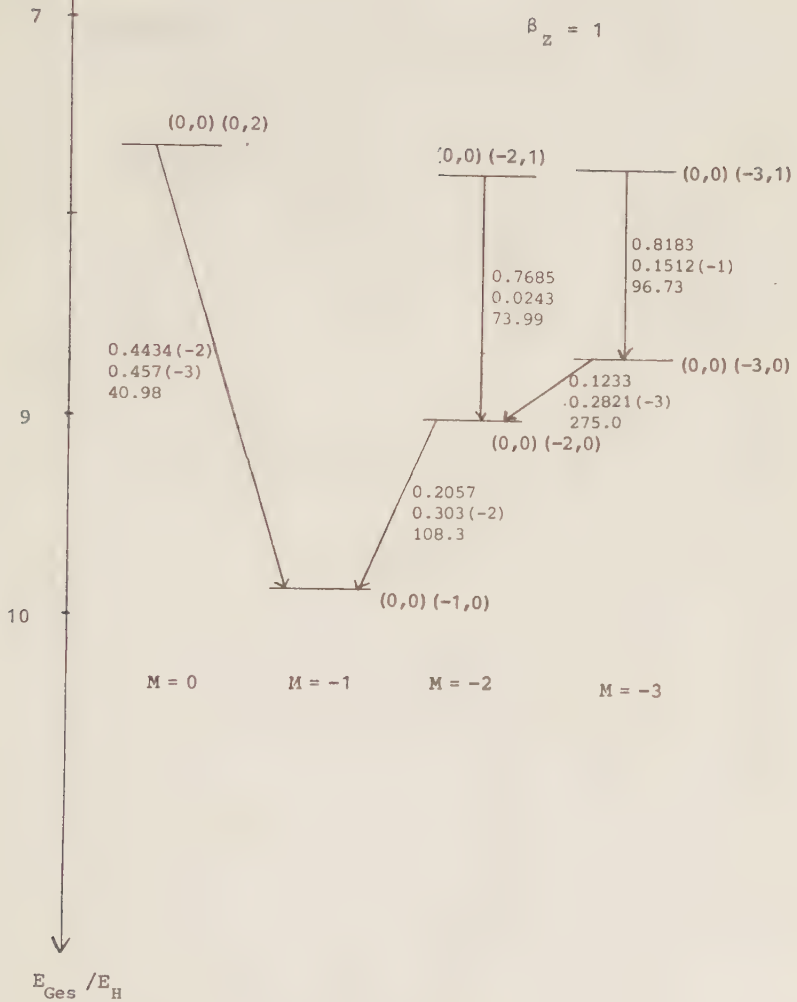


Bild 26

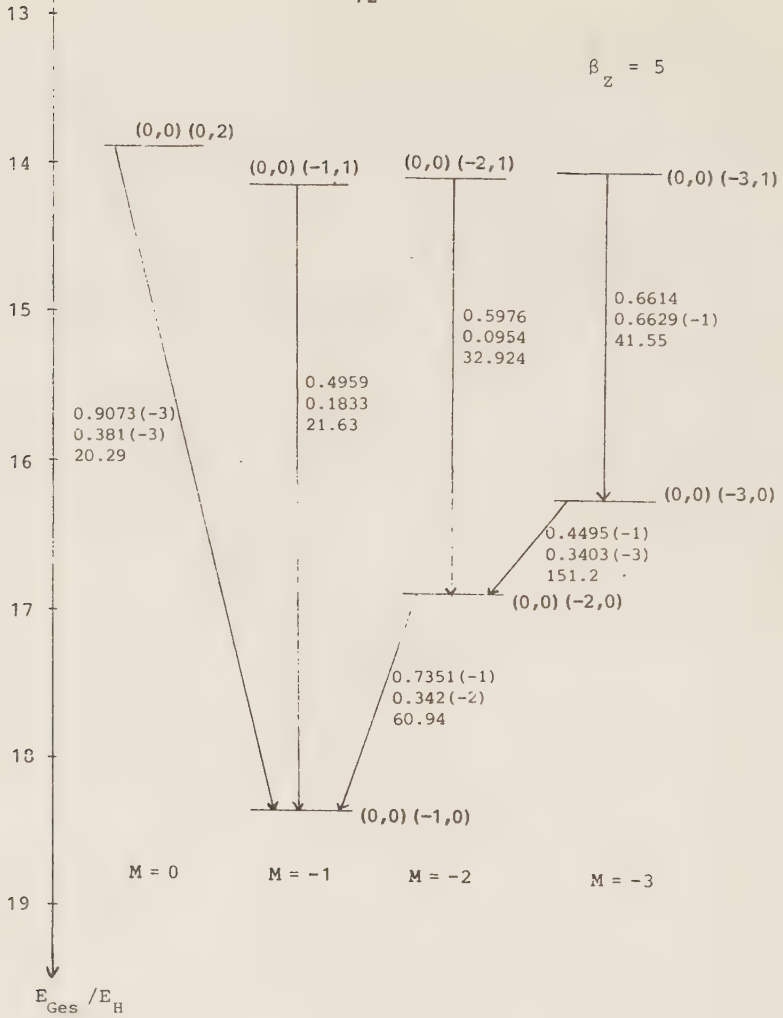


Bild 27

$$\beta_z = 10$$

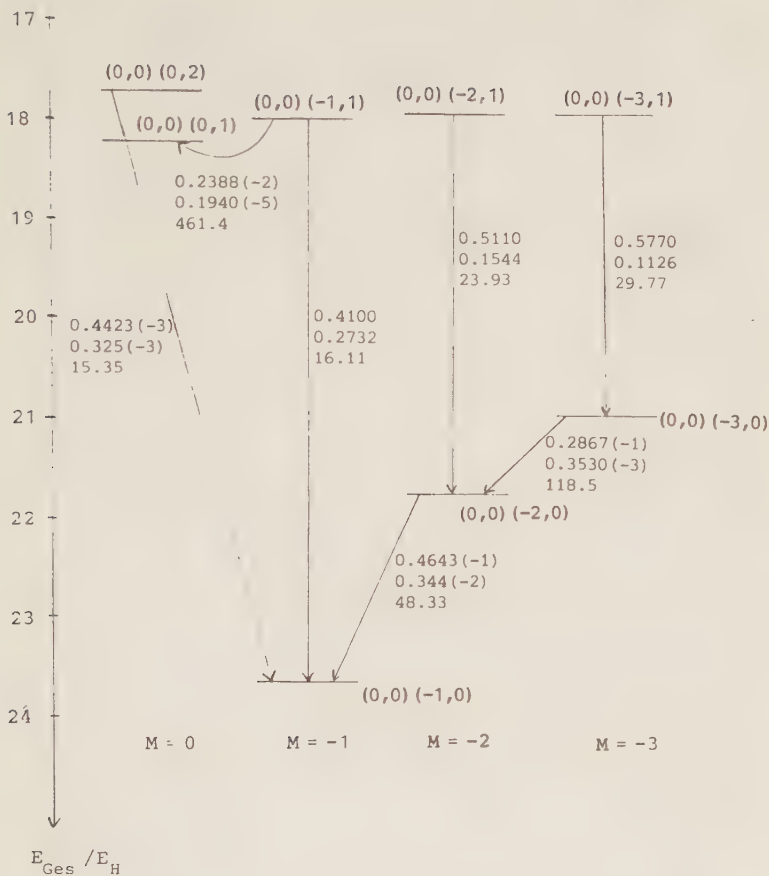


Bild 28

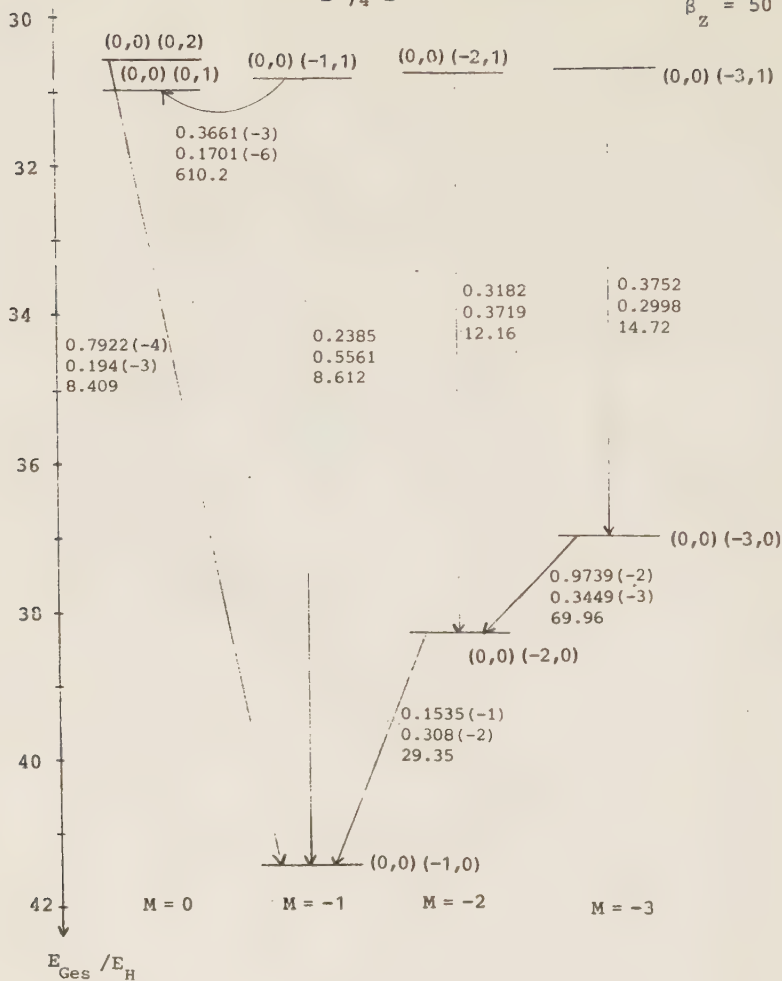


Bild 29

$$\beta_z = 100$$

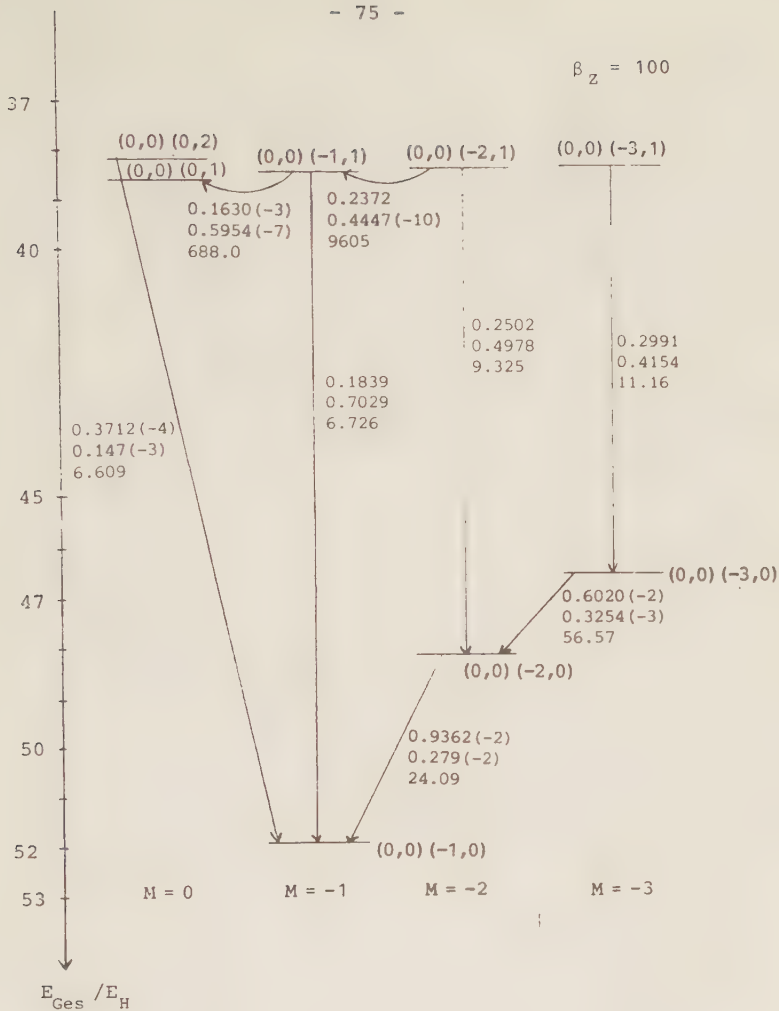


Bild 30

$$\beta_z = 250$$

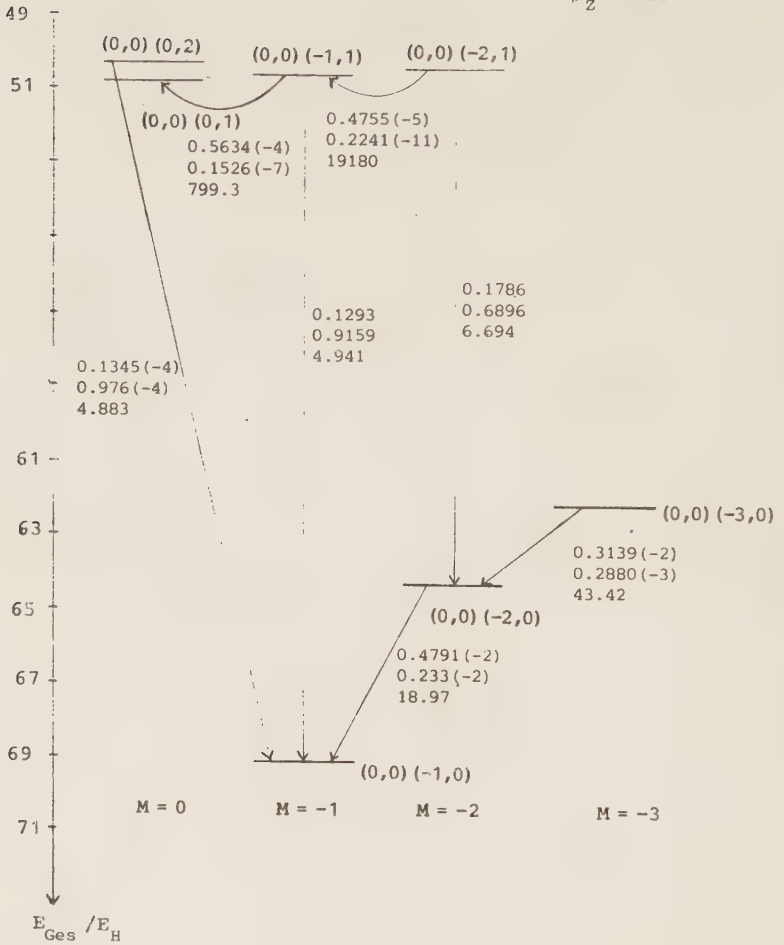


Bild 31

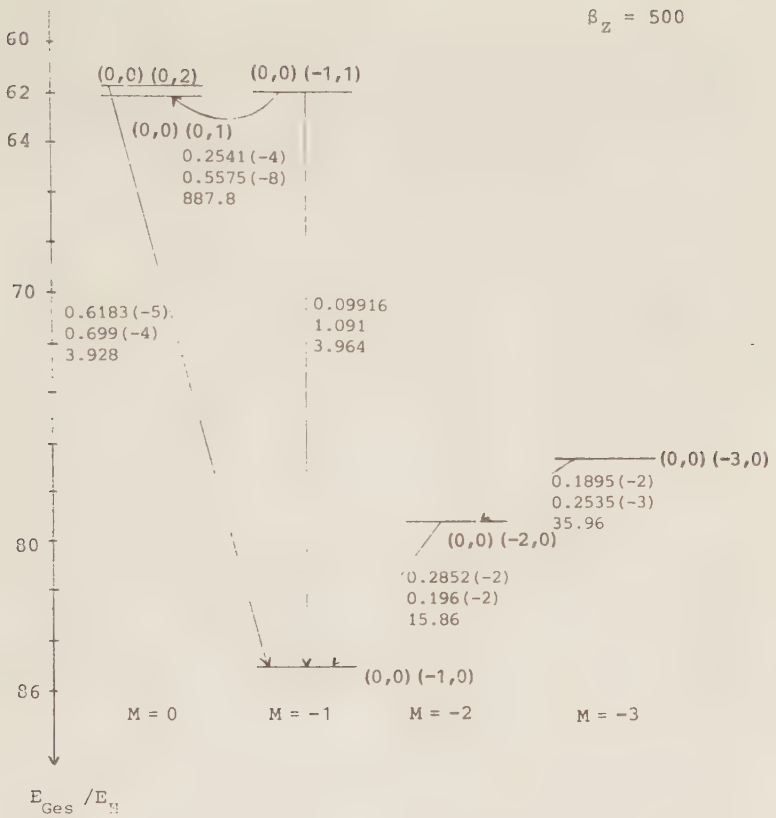


Bild 32

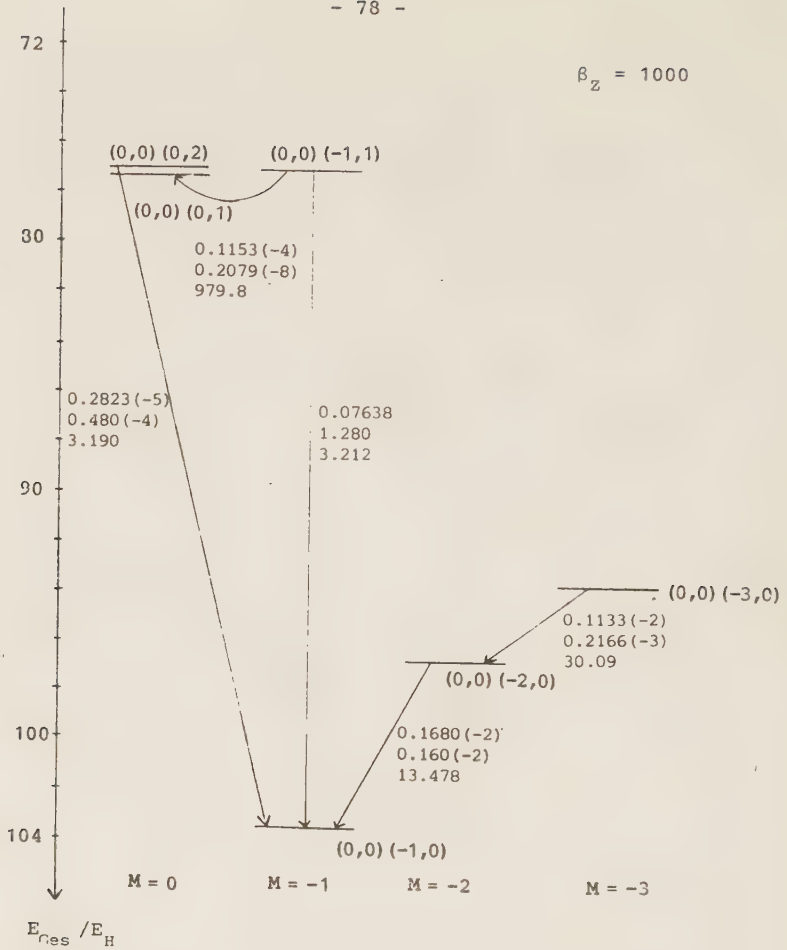


Bild 33

Anhang I

Einteilchenenergien E_1 und E_2 , Elektron-Elektron-Wechselwirkungsenergie E_{12} und Gesamtenergie E_{Ges} in Einheiten von $E_Z = Z^2 E_H$ und die Gesamtenergie in Elektronenvolt (eV).

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 1$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	1.79952	0.292741	0.180691	1.91157	104.028
(0,0) (-1,0)	1.79843	1.14946	0.480382	2.46751	134.282
(0,0) (-1,1)					
(0,0) (-2,0)	1.79902	0.913001	0.454789	2.25723	122.839
(0,0) (-2,1)	1.79953	0.390625	0.240828	1.94933	106.082
(0,0) (-3,0)	1.79929	0.783597	0.408505	2.17438	118.330
(0,0) (-3,1)	1.79954	0.359808	0.220426	1.93892	105.516

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 1$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	1.79955	0.330763	0.059786	2.07053	1802.85
(0,0) (-1,0)	1.79949	1.15409	0.122297	2.83128	2465.25
(0,0) (-1,1)					
(0,0) (-2,0)	1.79951	0.923731	0.117946	2.60530	2268.49
(0,0) (-2,1)	1.79955	0.431091	0.074313	2.15521	1876.59
(0,0) (-3,0)	1.79953	0.796139	0.106923	2.48874	2167.00
(0,0) (-3,1)	1.79955	0.395357	0.068488	2.12642	1851.52

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 1$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	1.79955	0.332075	0.035118	2.09650	5590.51
(0,0) (-1,0)	1.79953	1.15425	0.070035	2.88375	7689.75
(0,0) (-1,1)					
(0,0) (-2,0)	1.79954	0.924057	0.067654	2.65594	7082.29
(0,0) (-2,1)	1.79955	0.432297	0.043978	2.18787	5834.13
(0,0) (-3,0)	1.79955	0.796543	0.061374	2.53468	6758.92
(0,0) (-3,1)	1.79955	0.396421	0.039908	2.15607	5749.39

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 1$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	1.79955	0.332510	0.019214	2.11285	19431.8
(0,0) (-1,0)	1.79955	1.15431	0.037760	2.91609	26819.2
(0,0) (-1,1)					
(0,0) (-2,0)	1.79955	0.924164	0.036510	2.68720	24714.2
(0,0) (-2,1)	1.79955	0.432688	0.023954	2.20829	20309.6
(0,0) (-3,0)	1.79955	0.796621	0.033134	2.56304	23572.2
(0,0) (-3,1)	1.79955	0.396767	0.021731	2.17459	19999.7

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 5$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	3.33701	0.351144	0.220979	3.46717	188.683
(0,0) (-1,0)	3.33387	2.203740	0.947662	4.58994	249.785
(0,0) (-1,1)	3.33697	0.570549	0.370632	3.53689	192.478
(0,0) (-2,0)	3.33528	1.774890	0.894035	4.21610	229.440
(0,0) (-2,1)	3.33696	0.528061	0.340789	3.52423	191.789
(0,0) (-3,0)	3.33607	1.53673	0.807398	4.065398	221.239
(0,0) (-3,1)	3.33698	0.501342	0.321258	3.51706	191.398

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 5$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	3.33702	0.409189	0.777623	3.66845	3194.20
(0,0) (-1,0)	3.33683	2.21773	0.243479	5.31106	4624.46
(0,0) (-1,1)	3.33703	0.672198	0.131229	3.87799	3376.65
(0,0) (-2,0)	3.33690	1.80157	0.234264	4.90420	4370.19
(0,0) (-2,1)	3.33702	0.619936	0.120178	3.83678	3340.76
(0,0) (-3,0)	3.33695	1.56669	0.213466	4.69017	4083.83
(0,0) (-3,1)	3.33702	0.582922	0.111356	3.80859	3316.21

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 5$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	3.33703	0.411325	0.045989	3.70236	9872.65
(0,0) (-1,0)	3.33696	2.21821	0.139580	5.41559	14441.1
(0,0) (-1,1)	3.33703	0.675377	0.077294	3.93511	10493.3
(0,0) (-2,0)	3.33698	1.80240	0.134527	5.00485	13345.8
(0,0) (-2,1)	3.33703	0.622874	0.070808	3.88909	10370.6
(0,0) (-3,0)	3.33700	1.56758	0.122663	4.78192	12751.4
(0,0) (-3,1)	3.33703	0.585527	0.065524	3.85703	10285.1

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 5$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)					
(0,0) (0,2)	3.33703	0.412039	0.025263	3.72380	34247.8
(0,0) (-1,0)	3.33701	2.21837	0.075303	5.48008	50400.2
(0,0) (-1,1)	3.33703	0.67641	0.042344	3.971096	36522.1
(0,0) (-2,0)	3.33702	0.623834	0.037987	3.92206	36071.1
(0,0) (-3,0)	3.33702	1.56787	0.066265	4.83862	44500.7
(0,0) (-3,1)	3.33703	0.586379	0.035878	3.88753	35753.5

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 10$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	4.29777	0.724353	0.466086	4.55604	247.940
(0,0) (0,2)	4.29861	0.374345	0.236783	4.43617	241.417
(0,0) (-1,0)	4.29364	2.88038	1.25343	5.92058	322.198
(0,0) (-1,1)	4.29854	0.610423	0.402289	4.50668	245.253
(0,0) (-2,0)	4.29572	2.33497	1.18144	5.44925	296.548
(0,0) (-2,1)	4.29854	0.575445	0.376844	4.49714	244.734
(0,0) (-3,0)	4.29697	2.03006	1.06995	5.25708	286,090
(0,0) (-3,1)	4.29856	0.553510	0.360167	4.491899	244.449

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 10$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	4.29846	0.821592	0.153320	4.96673	4324.63
(0,0) (0,2)	4.29862	0.440385	0.084899	4.65410	4052.42
(0,0) (-1,0)	4.29842	2.90234	0.259271	6.94148	6044.09
(0,0) (-1,1)	4.29861	0.745139	0.152184	4.89157	4259.19
(0,0) (-2,0)	4.29840	2.37356	0.311053	6.36090	5538.57
(0,0) (-2,1)	4.29861	0.697963	0.141258	4.85532	4227.62
(0,0) (-3,0)	4.29848	2.07283	0.284194	6.08711	5300.17
(0,0) (-3,1)	4.29861	0.663499	0.132214	4.82990	4205.49

Silicium Si^{14+} $Z = 14$ $\beta_Z = 10$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	4.29857	0.824445	0.089755	5.03326	13421.6
(0,0) (0,2)	4.29862	0.442871	0.050321	4.69117	12509.4
(0,0) (-1,0)	4.29852	2.90268	0.185562	7.01564	18707.7
(0,0) (-1,1)	4.29862	0.749603	0.090204	4.95802	13220.9
(0,0) (-2,0)	4.29855	2.37475	0.178720	6.49458	17318.3
(0,0) (-2,1)	4.29862	0.702092	0.083720	4.91699	13111.6
(0,0) (-3,0)	4.29858	2.07410	0.163390	6.20929	16557.6
(0,0) (-3,1)	4.29862	0.667181	0.078226	4.88757	13033.1

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 10$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	4.29861	0.825373	0.049006	5.07497	46674.4
(0,0) (0,2)	4.29862	0.443705	0.027680	4.71465	43360.5
(0,0) (-1,0)	4.29859	2.90293	0.100142	7.10138	65311.2
(0,0) (-1,1)	4.29862	0.751065	0.049594	5.00009	45985.7
(0,0) (-2,0)	4.29860	2.37515	0.096544	6.57720	60490.4
(0,0) (-2,1)	4.29862	0.703448	0.046029	4.95604	45580.6
(0,0) (-3,0)	4.29861	2.07452	0.088293	6.28483	57801.5
(0,0) (-3,1)	4.29852	0.668390	0.042968	4.92404	45286.3

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 50$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	7.49343	0.758825	0.503065	7.74919	421.711
(0,0) (0,2)	7.49368	0.423982	0.270368	7.64729	416.166
(0,0) (-1,0)	7.47975	5.19386	2.31690	10.3567	563.612
(0,0) (-1,1)	7.49359	0.662592	0.444324	7.71186	419.679
(0,0) (-2,0)	7.48487	4.27880	2.18302	9.58064	521.379
(0,0) (-2,1)	7.49359	0.645499	0.431555	7.70802	419.471
(0,0) (-3,0)	7.48826	3.75853	1.99209	9.25471	503.641
(0,0) (-3,1)	7.49360	0.636726	0.423817	7.70651	419.388

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 50$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	7.49360	0.919563	0.187041	8.22612	7162.65
(0,0) (0,2)	7.49369	0.506297	0.099788	7.90020	6878.86
(0,0) (-1,0)	7.49279	5.24737	0.605046	12.1351	10566.3
(0,0) (-1,1)	7.49366	0.873388	0.194156	8.17289	7116.30
(0,0) (-2,0)	7.49302	4.36388	0.581367	11.2755	9817.83
(0,0) (-2,1)	7.49366	0.843923	0.185871	8.15171	7097.86
(0,0) (-3,0)	7.49323	3.85106	0.534987	10.8093	9411.88
(0,0) (-3,1)	7.49367	0.820860	0.178252	8.13627	7084.42

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 50$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	7.49365	0.924716	0.110659	8.30771	22153.2
(0,0) (0,2)	7.49396	0.509503	0.059352	7.94384	21182.9
(0,0) (-1,0)	7.49339	5.24923	0.347529	12.3951	33052.6
(0,0) (-1,1)	7.49368	0.881725	0.117012	8.25839	22021.7
(0,0) (-2,0)	7.49347	4.36656	0.334485	11.5255	30733.8
(0,0) (-2,1)	7.49368	0.851759	0.111915	8.23352	21955.3
(0,0) (-3,0)	7.49364	3.85388	0.307971	11.0395	29437.6
(0,0) (-3,1)	7.49368	0.828013	0.107062	8.21463	21905.0

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 50$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	7.49368	0.926402	0.060780	8.35930	76880.3
(0,0) (0,2)	7.49369	0.510585	0.032716	7.97156	73314.2
(0,0) (-1,0)	7.49360	5.24985	0.187708	12.5557	115475
(0,0) (-1,1)	7.49368	0.884512	0.064959	8.31324	76456.7
(0,0) (-2,0)	7.49362	4.36745	0.180834	11.6802	107422
(0,0) (-2,1)	7.49368	0.854382	0.062100	8.28597	76205.9
(0,0) (-3,0)	7.49364	3.85481	0.166549	11.1819	103839
(0,0) (-3,1)	7.49369	0.830403	0.059323	8.26476	76010.9

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 100$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	9.38329	0.761087	0.507366	9.63701	524.446
(0,0) (0,2)	9.38343	0.443495	0.283552	9.54338	519.350
(0,0) (-1,0)	9.36227	6.59791	2.96978	12.9904	706.938
(0,0) (-1,1)	9.38335	0.672863	0.452303	9.60391	522.645
(0,0) (-2,0)	9.36965	5.47514	2.79985	12.0449	655.485
(0,0) (-2,1)	9.38335	0.662053	0.443866	9.60154	522.516
(0,0) (-3,0)	9.37469	4.83192	2.56440	11.6422	633.569
(0,0) (-3,1)	9.38336	0.656959	0.439339	9.60098	522.485

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 100$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	9.38337	0.943991	0.197081	10.1303	8820.64
(0,0) (0,2)	9.38344	0.531946	0.105526	9.80986	8541.64
(0,0) (-1,0)	9.38206	6.67401	0.779694	15.2765	13301.5
(0,0) (-1,1)	9.38341	0.908711	0.207162	10.0849	8781.17
(0,0) (-2,0)	9.38240	5.59131	0.749317	14.2244	12385.5
(0,0) (-2,1)	9.38341	0.886974	0.200610	10.0698	8767.95
(0,0) (-3,0)	9.38271	4.95761	0.691910	13.6484	11883.9
(0,0) (-3,1)	9.38341	0.869551	0.194244	10.0587	8758.33

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 100$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	9.38341	0.950161	0.117123	10.2165	27243.0
(0,0) (0,2)	9.38344	0.535420	0.062825	9.85603	26281.9
(0,0) (-1,0)	9.38299	6.67666	0.448138	15.6115	41629.4
(0,0) (-1,1)	9.383443	0.918805	0.125727	10.1765	27136.5
(0,0) (-2,0)	9.38309	5.59502	0.431377	14.5467	38790.0
(0,0) (-2,1)	9.38343	0.896568	0.121620	10.1584	27088.1
(0,0) (-3,0)	9.38320	4.96148	0.398535	13.9461	37188.5
(0,0) (-3,1)	9.38343	0.878423	0.117454	10.1444	27050.8

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 100$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	9.38343	0.952190	0.064496	10.2711	94463.3
(0,0) (0,2)	9.38344	0.536594	0.034650	9.88538	90910.6
(0,0) (-1,0)	9.38331	6.67755	0.242144	15.8187	145484
(0,0) (-1,1)	9.38343	0.922217	0.070092	10.2356	94136.2
(0,0) (-2,0)	9.38334	5.59624	0.233302	14.7463	135621
(0,0) (-2,1)	9.38343	0.899812	0.067763	10.2155	93951.6
(0,0) (-3,0)	9.38337	4.96275	0.215600	14.1306	129958
(0,0) (-3,1)	9.38344	0.881416	0.065343	10.1995	93804.7

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 250$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	12.4597	0.759486	0.508089	12.7110	691.737
(0,0) (0,2)	12.4598	0.467484	0.299795	12.6274	687.186
(0,0) (-1,0)	12.4241	8.92651	4.05821	17.2924	941.053
(0,0) (-1,1)	12.4597	0.680959	0.458060	12.6826	690.186
(0,0) (-2,0)	12.4357	7.48034	3.83153	16.0846	875.319
(0,0) (-2,1)	12.4597	0.675260	0.453552	12.6814	690.122
(0,0) (-3,0)	12.4439	6.64335	3.52738	15.5599	846.768
(0,0) (-3,1)					

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 250$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	12.4597	0.964209	0.206415	13.2175	11508.8
(0,0) (0,2)	12.4598	0.563429	0.112560	12.9196	11241.5
(0,0) (-1,0)	12.4574	9.04353	1.07306	20.4279	17787.0
(0,0) (-1,1)	12.4597	0.93968	0.219157	13.1802	11476.3
(0,0) (-2,0)	12.4580	7.65091	1.03193	19.0769	16610.7
(0,0) (-2,1)	12.4597	0.926342	0.214820	13.1712	11468.5
(0,0) (-3,0)	12.4585	6.82698	0.957406	18.3280	15958.6
(0,0) (-3,1)					

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 250$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	12.4597	0.971580	0.123318	13.3080	35486.9
(0,0) (0,2)	12.4598	0.567225	0.067079	12.9599	34558.6
(0,0) (-1,0)	12.4590	9.04764	0.617303	20.8893	55703.1
(0,0) (-1,1)	12.4597	0.951821	0.134078	13.2775	35405.5
(0,0) (-2,0)	12.4592	7.65643	0.594558	19.5210	52054.4
(0,0) (-2,1)	12.4597	0.938057	0.131290	13.2665	35376.2
(0,0) (-3,0)	12.4593	6.83271	0.551880	18.7402	49972.1
(0,0) (-3,1)					

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 250$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	12.4598	0.974022	0.068116	13.3657	122924
(0,0) (0,2)	12.4598	0.568508	0.037017	12.9913	119480
(0,0) (-1,0)	12.4595	9.04901	0.333728	21.1748	194744
(0,0) (-1,1)	12.4598	0.955988	0.075119	13.3406	122693
(0,0) (-2,0)	12.4596	7.65824	0.321713	19.7961	182064
(0,0) (-2,1)	12.4598	0.942076	0.073514	13.3283	122580
(0,0) (-3,0)	12.4596	6.83459	0.298695	18.9955	174701
(0,0) (-3,1)					

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 500$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	15.2806	0.757045	0.506961	15.5307	845.179
(0,0) (0,2)	15.2806	0.484241	0.311109	15.4537	840.989
(0,0) (-1,0)	15.2290	11.1000	5.07692	21.2521	1156.54
(0,0) (-1,1)	15.2806	0.685017	0.460569	15.5050	843.782
(0,0) (-2,0)	15.2450	9.37132	4.80061	19.8157	1078.36
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	15.2564	8.36309	4.43732	19.1822	1043.89
(0,0) (-3,1)					

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 500$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	15.2806	0.973075	0.211065	16.0426	13968.6
(0,0) (0,2)	15.2806	0.585471	0.117500	15.7486	13712.6
(0,0) (-1,0)	15.2772	11.2579	1.34957	25.1856	21929.6
(0,0) (-1,1)	15.2806	0.954062	0.224839	16.0098	13940.0
(0,0) (-2,0)	15.2779	9.59469	1.29884	23.5738	20526.2
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	15.2787	8.60288	1.20948	22.6720	19741.0
(0,0) (-3,1)					

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 500$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	15.2806	0.981197	0.126516	16.1353	43026.0
(0,0) (0,2)	15.2806	0.589490	0.070064	15.8000	42132.1
(0,0) (-1,0)	15.2795	11.2635	0.776896	25.7661	68707.5
(0,0) (-1,1)	15.2806	0.967417	0.138213	16.1098	42958.1
(0,0) (-2,0)	15.2797	9.60200	0.748797	24.1329	64352.4
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	15.2800	8.61045	0.697585	23.1928	61845.5
(0,0) (-3,1)					

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 500$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	15.2806	0.983902	0.070020	16.1945	148940
(0,0) (0,2)	15.2806	0.590850	0.038678	15.8328	145613
(0,0) (-1,0)	15.2803	11.2654	0.420179	26.1255	240275
(0,0) (-1,1)	15.2806	0.972050	0.077673	16.1750	148761
(0,0) (-2,0)	15.2804	9.60441	0.405321	24.4798	225137
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	15.2804	8.61294	0.377686	23.5157	216273
(0,0) (-3,1)					

Helium $Z = 2$ $\beta_Z = 1\,000$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	18.5738	0.754547	0.505408	18.8229	1024.34
(0,0) (0,2)	18.5738	0.499806	0.321790	18.7518	1020.48
(0,0) (-1,0)	18.5009	13.6755	6.284667	25.8917	1409.03
(0,0) (-1,1)	18.5738	0.688320	0.462398	18.7997	1023.08
(0,0) (-2,0)	18.5222	11.6319	5.95340	24.2007	1317.02
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	18.5379	10.4308	5.52523	23.4435	1275.79
(0,0) (-3,1)					

Sauerstoff O^{6+} $Z = 8$ $\beta_Z = 1\,000$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	18.5738	0.978367	0.214194	19.3380	16837.9
(0,0) (0,2)	18.5738	0.606040	0.122133	19.0577	16593.9
(0,0) (-1,0)	18.5691	13.8842	1.67925	30.7740	26795.6
(0,0) (-1,1)	18.5738	0.963101	0.228307	19.3086	16812.4
(0,0) (-2,0)	18.5700	11.9193	1.61770	28.8716	25139.0
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	18.5709	10.7386	1.51197	27.7976	24.203.9
(0,0) (-3,1)					

Silicium Si^{12+} $Z = 14$ $\beta_Z = 1\,000$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	18.5738	0.987094	0.128741	19.4322	51817.5
(0,0) (0,2)	18.5738	0.610269	0.072864	19.1112	50961.7
(0,0) (-1,0)	18.5723	13.8917	0.967322	31.4966	83988.2
(0,0) (-1,1)	18.5738	0.977350	0.140850	19.4103	51759.2
(0,0) (-2,0)	18.5726	11.9288	0.933175	29.5682	78845.9
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	18.5728	10.7485	0.872533	28.4488	75861.1
(0,0) (-3,1)					

Eisen Fe^{24+} $Z = 26$ $\beta_Z = 1\,000$

Zustand	E_1	E_2	E_{12}	E_{Ges}	E_{Ges} in eV
(0,0) (0,1)	18.5738	0.990017	0.071369	19.4925	179272
(0,0) (0,2)	18.5738	0.611700	0.040236	19.1453	176078
(0,0) (-1,0)	18.5734	13.8941	0.523381	31.9442	293789
(0,0) (-1,1)	18.5738	0.982341	0.079344	19.4798	179128
(0,0) (-2,0)	18.5735	11.9319	0.505306	30.0001	275910
(0,0) (-2,1)					
(0,0) (-3,0)	18.5738	10.7517	0.472568	28.8527	265358
(0,0) (-3,1)					

Anhang II

An dieser Stelle sollen die in II.2 und II.3 beschriebenen Auswahlregeln für das Ein- und Zweielektronenatom mit Hilfe des Axioms der vollständigen Induktion auf das n-Elektronenatom erweitert werden.

1. n sei die Anzahl der Elektronen.

Die Auswahlregeln gelten für $n = 1$ und $n = 2$.

2. Die Auswahlregeln gelten für $n = n_0$.

Das Matrixelement ist verschieden null, wenn gilt:

$$a) \quad |\Delta M| = |M' - M| = 1 \quad \text{mit} \quad M' = m'_1 + m'_2 + \dots + m'_{n_0}$$

$$M = m_1 + m_2 + \dots + m_{n_0}$$

$$\text{o.B.d.A. soll gelten: } m_1 = m'_1; m_2 = m'_2; \dots; m'_{n_0-1} = m_{n_0-1};$$

$$m'_{n_0} \neq m_{n_0}$$

$\prod_{i=1}^{n_0} f'_{m'_i} v'_i$ und $\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i} v_i$ sind symmetrisch oder antisymmetrisch.

$$b) \quad \Delta M = |M' - M| = 0, \text{ wobei } m'_i = m_i \text{ für alle } i \in \{1, \dots, n_0\}.$$

$\prod_{i=1}^{n_0} f'_{m'_i} v'_i$ ist symmetrisch und $\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i} v_i$ ist antisymmetrisch oder umgekehrt.

$$\text{o.B.d.A. soll gelten: } v'_1 = v_1; \dots; v'_{n_0-1} = v_{n_0-1}; v'_{n_0} \neq v_{n_0}$$

3. Nachweis der Auswahlregeln für $n = n_0 + 1$

a) Es gelten die Bedingungen von 2a).

$$\text{Zusätzlich sei } m'_{n_0+1} = m_{n_0+1} \quad \text{und} \quad v'_{n_0+1} = v_{n_0+1}.$$

Das Matricelement hat für $n = n_0 + 1$ die Form:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_f | \underline{r}_1 + \dots + \underline{r}_{n_0+1} | \Psi_i \rangle = & \\
 & \sum_{\substack{j=1 \\ j'=1 \\ l=1}}^{(n_0+1)!, (n_0+1)!, n_0+1} (-1)^{i+1} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f \left(\prod_{i=1}^{n_0+1} f'_{m_i, v_i} (k_i^j) \right) \cdot \\
 & \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f \left(\prod_{i=1}^{n_0+1} \phi_{m_i}^*(k_i^{j'}) \right) \right) \cdot \underline{r}_l \left(\prod_{i=1}^{n_0+1} \phi_{m_i} (k_i^j) d\phi_i \rho_i d\rho_i \right) \cdot \prod_{i=1}^{n_0+1} (f_{m_i, v_i} (k_i^j) dz_i) \quad (1) \\
 & \substack{0 \quad 00 \quad 0 \\ n_0+1 \quad n_0+1}
 \end{aligned}$$

Dabei ist $k_1^j, \dots, k_{n_0+1}^j$ die j -te Permutation der Zahlen $1, 2, \dots, n_0+1$.

Aus den Produkten der Landauwellenfunktionen werden die Integrationen über ρ und ϕ herausgezogen, in denen die Quantenzahl m_{n_0+1} des (n_0+1) -ten Teilchens oder die (n_0+1) -te Koordinate vorkommt. Ferner werden von der Summe die Terme mit $\underline{r}_{n_0+1}$ abgetrennt.

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j'=1 \\ l=1}}^{(n_0+1)! , (n_0+1)! , n_0} (-1)^{i+1} f \dots f \left(\prod_{i=1}^{\infty} f'_{m'_i \nu_i} (k_1^j) \right) \cdot \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left(\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f \Phi_{m_i}^{*j} (k_i^j) \Phi_{m_{n_0+1}} (k_{n_0+1}^j) d\phi_i \rho_i d\rho_i \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f \Phi_{m_{n_0+1}}^{*j'} (k_{n_0+1}^{j'}) \Phi_{m_i} (k_i^j) d\phi_{i'} \rho_{i'} d\rho_{i'} \right) \\ & k_{i'}^{j'} = k_{n_0+1}^j \quad k_{n_0+1}^{j'} = k_i^j, \quad (2.2) \\ & \cdot \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f \Phi_{m_i}^{*j} (k_i^j) \Phi_{m_{n_0+1}} (k_{n_0+1}^j) d\phi_{m_i} \rho_{m_i} d\rho_{m_i} \cdot \end{aligned}$$

$$\int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} f \left(\prod_{i=1}^{n_0} \Phi_{m_i}^{*j} (k_i^j) \right) \prod_{i=1}^{n_0} \left(\Phi (k_i^j) d\phi_i \rho_i d\rho_i \right) \cdot \quad (2.3)$$

$$\prod_{i=1}^{n_0+1} (f_{m_i \nu_i} (k_i^j) dz_i) + \quad (2.1)$$

$$+ \sum_{\substack{j=1 \\ j'=1}}^{(n_0+1)! , (n_0+1)!} \dots \dots \dots \text{wie (1)} \quad \dots \dots \dots \text{wie (1)} \quad (2.4)$$

In Term (2.3) sind unter Voraussetzung der Bedingung (2a) und wie unter II.3 beschrieben wegen der Orthogonalität der Landauwellenfunktionen nur diejenigen Integrationen nach ϕ und ρ in der $\rho; \phi$ -Komponente verschieden null, bei denen auf beiden Seiten die gleichen Permutationen in den Koordinaten auftreten und $\underline{r}_1 \in \{1, \dots, n_0\}$ gerade auf das Teilchen wirkt, das die Quantenzahl, wie in 2a) vereinbart, von m_{n_0} auf m'_{n_0} ändert.

Bei Term (2.2) sind wegen der Orthogonalität der Landauwellenfunktionen nur die Integrationen nach ϕ und ρ verschieden null, bei denen bei ϕ' und ϕ die gleiche Quanten-

zahl und die gleiche Koordinate auftritt. Dies gilt insbesondere auch für die Quantenzahlen $m_{n_0+1} = m'_{n_0+1}$ und die Koordinaten n_0+1 . Also ist die Auswahlregel auch für das (n_0+1) -te Teilchen erfüllt.

Bei Term (2.4) ist nur der Summand verschieden null, bei dem das (n_0+1) -te Teilchen, auf das der Operator r_{n_0+1} wirkt, seine Quantenzahl von m_{n_0} auf m'_{n_0} ändert. Also auch hier gilt die Auswahlregel für das (n_0+1) -te Teilchen.

Nach den Auswahlregeln ergibt die Integration der longitudinalen Funktionen nach $z_1, z_2, \dots, z_{n_0}$ im Term (2.1) verschieden null, wenn $\prod_{i=1}^{n_0} f'_{m'_i} v'_i$ und $\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i} v_i$ gleiche Parität haben. Ist dies der Fall, dann haben auch

$$\prod_{i=1}^{n_0} f'_{m'_i} v'_i \cdot f'_{m'_{n_0+1}} v'_{n_0+1} \quad \text{und} \quad \prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i} v_i \cdot f_{m_{n_0+1}} v_{n_0+1}$$

gleiche Parität, weil $v'_{n_0+1} = v_{n_0+1}$ ist. Es ist also wieder die Auswahlregel für das (n_0+1) -te Teilchen erfüllt.

Die Integration der Landauwellenfunktionen nach ρ, ϕ in der z -Komponente ergibt in jedem Fall 0, weil das Integral

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \phi_{m'_{n_0}}^* (\rho_i, \phi_i, z_i) \cdot z \cdot \phi_{m_{n_0}} (\rho_i, \phi_i, z_i) \rho_i \phi_i d\rho_i$$

wegen der Orthogonalität der Landauwellenfunktionen in jedem Summanden von (1) gleich 0 ist.

b) Es gelten die Bedingungen von 2 b).

Zusätzlich sei $v'_{n_0+1} = v_{n_0+1}$ und $m'_{n_0+1} = m_{n_0+1}$.

Die Integration in der ρ - und ϕ -Komponente ist immer 0, wenn $m'_i = m_i$ für alle $i \in \mathbb{N}$. Denn in jedem Summanden von (1) kommen Integrale der Art

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Phi_{m_i'}^* (\rho_i, \phi_i, z_i) (\rho_i (e^{i\phi_i} + e^{-i\phi_i}) \Phi_{m_i} (\rho_i, \phi_i, z_i) d\phi_i \rho_i d\rho_i,$$

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Phi_{m_i'}^* (\rho_i, \phi_i, z_i) (\rho_i / i (e^{i\phi_i} - e^{-i\phi_i}) \Phi_{m_i} (\rho_i, \phi_i, z_i) d\phi_i \rho_i d\rho_i$$

mit $m_i' = m_i$ und

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Phi_{m_i'}^* (\rho_i, \phi_i, z_i) \Phi_{m_i'}^* (\rho_i, \phi_i, z_i) d\phi_i \rho_i d\rho_i \quad \text{mit } m_i' \neq m_i, \\ i \neq i'$$

vor, die immer 0 für alle $m_i, m_i' \in \mathbb{N}$ ergeben.

Bei der Integration der Landauwellenfunktionen nach ρ und ϕ in der z -Komponente ergeben alle die Summanden z_i , also verschieden 0, bei denen auf beiden Seiten die gleiche Permutation in den Koordinaten auftritt. Dies folgt wieder unmittelbar aus der Orthonormiertheit der Landauwellenfunktionen und gilt für alle $m_i' = m_i$ für alle $i \in \mathbb{N}$.

In den Summanden, in denen verschiedene Permutationen in den Koordinaten auftreten, ist die Integration nach ρ und ϕ in der z -Komponente wegen der Orthogonalität der Landauwellenfunktion null. Übrig bleiben in der z -Komponente Summanden der Art:

$$\int_{-\infty}^\infty \dots \int_{-\infty}^\infty \prod_{i=1}^{n_0+1} f_{m_i' \vee_i}^* (k_i^{j_i}) \cdot z_{k_i^{j_i} \in \{1, \dots, n_0+1\}} \prod_{i=1}^{n_0+1} (f_{m_i \vee_i} (k_i^{j_i}) dz_i)$$

Die Integration nach $z_1, \dots, z_{n_0}$ ergibt nach den beschriebenen Auswahlregeln in II.3 und Bedingung 2b) nicht in allen Summanden null, wenn links $\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i' \vee_i}^*$ symmetrisch und rechts $\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i \vee_i}$ antisymmetrisch oder umgekehrt ist.

Ist dies der Fall, dann haben auch $\prod_{i=1}^{n_0} f'_{m_i v'_i} \cdot f'_{m_{n_0+1} v'_{n_0+1}}$ und

$\prod_{i=1}^{n_0} f_{m_i v_i} \cdot f_{m_{n_0+1} v_{n_0+1}}$ verschiedene Parität, wenn $v'_{n_0+1} = v_{n_0+1}$

ist. Es ist also wieder die Auswahlregel für das (n_0+1) -te Teilchen erfüllt.

4. Weil die Erweiterung der Auswahlregeln von n_0 auf n_0+1 gelungen ist, gelten die Auswahlregeln für alle $n \in \mathbb{N}$.

Literaturverzeichnis

- 1 V. Canuto und D.C. Kelly: Hydrogen Atom in Intense Magnetic Fields. Astrophysics and Space Science 17; 1972
- 2 Ch. Froese-Fischer: A General Multi-Configuration Hartree-Fock Program. Computer Physics Communications 14 (145); 1978
- 3 Ch. Froese-Fischer: Numerical Solution of the Hartree-Fock Equations. Canadian Journal of Physics 41 (1895-1910); 1963
- 4 P. Gombàs: Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik. Verlag Birkhäuser; Basel 1950
- 5 D.M. Larsen: Variational Studies of Bound States of the H^- -Ion in a Magnetic Field. Physical Review B 20 (5217); 1979
- 6 R.O. Mueller, A.R.P. Rau, Larry Spruch: Lowest Energy Levels of H^- , He, and Li^+ in Intense Magnetic Fields. Physical Review A, Volume 11, Number 3 (789-795); 1974
- 7 P. Pröschel: Hartree-Fock Rechnungen an Atomen in extrem starken magnetischen Feldern. Doktorarbeit; Erlangen 1982
- 8 P. Pröschel, W. Rösner, G. Wunner, H. Ruder and H. Herold: Hartree-Fock Calculations for Atoms in Strong Magnetic Fields. Journal of Physics B: AZ. Mol. Phys. 15 (1959-1976); 1982
- 9 W. Rösner: Das H-Atom in Magnetfeldern zwischen 50 T und $5 \cdot 10^8$ T. Doktorarbeit; Erlangen 1982

- 10 W. Rösner, H. Herold, H. Ruder and G. Wunner: Approximate Solution of the Strongly Magnetized Hydrogen Problem Using an Asymptotic Property. Physical Review A; in press 1983
- 11 J. Simola and V. Virtamo: Energij Levels of Hydrogen Atoms in a Strong Magnetic Field. Journal of Physics B: Atom. Molec. Phys., Vol. 11, No. 19 (3309-3322); 1978
- 12 G. Thurner: Hartree-Fock Rechnungen für das Zweielektronensystem im homogenen Magnetfeld. Doktorarbeit; Erlangen 1983
- 13 J. Trümper, W. Pietsch, C. Reppin, B. Sacco, E. Kendziorra, R. Staubert: Annals of the New York Academy of Sciences Vol. 302 (538-544); 1977
- 14 H.C. Überla: Das Wasserstoffatom im extrem starken Magnetfeld. Diplomarbeit; Erlangen 1979
- 15 J. Virtamo: Hartree-Fock Calculation of the Ground State Energies of Two-Electron Atoms in an Intense Magnetic Field. Journal of Physics B: Atom. Molec. Phys., Vol. 9, No. 5 (751-760); 1976
- 16 G. Wunner, H. Ruder: Electromagnetic Transitions for the Hydrogen Atom in Strong Magnetic Fields. The Astrophys. Journal 242 (828-842); 1980
- 17 G. Wunner, H. Ruder and H. Herold: Energy Levels and Oscillator Strengths for the Two-Body Problem in Magnetic Fields. The Astrophysical Journal 247 (347-381); 1981

- 18 G. Wunner, H. Ruder and H. Herold: Quality of One-Configuration HF-Type Calculations for the H-Atom in Arbitrary Magnetic Fields. Physics Letters A 85A (430);1981
- 19 G. Wunner: Atomphysik in extrem starken Magnetfeldern. Habilitationsschrift; Erlangen 1981
- 20 L.S. Schiff, H. Snyder: Theory of the Quadratic Zeeman-Effect. Phys. Rev. Vol.55 (59-63); 1939
- 21 KAU Lindgren, J. Virtamo: J. Phys. B: At. Mol. Phys. 12 (3465); 1979
- 22 Friedrich und Chu: in Druck 1983
- 23 Wunner et al.: in Druck 1983

Mein Dank gilt:

Herrn Prof. Dr. H. Ruder für die Überlassung dieses interessanten Themas und seine ständige Bereitschaft, alle anstehenden Fragen zu diskutieren.

Herrn Dr. G. Wunner für die vielen Gespräche, die geholfen haben, neue Aspekte aufzuzeigen und manchen toten Punkt zu überwinden.

Herrn Dr. P. Pröschel für die Einweisung ins Programm und manchen hilfreichen Tip bei der Handhabung eines Computer-Datensichtgeräts.

Den Mitgliedern der Gruppe von Prof. Ruder, insbesondere den Herren Dr. W. Rösner und Dr. H. Herold für manch klärende Diskussion und Unterstützung.

Frau Ruth Thurner für die Ausführung der Schreibarbeiten und Frau Stumpf für das Schreiben der langen Ergebnistabellen.

Lebenslauf

Angaben zur Person

Name:	Körbel, Heinrich Fritz
Geburtsdatum:	14.8.1948
Geburtsort:	Nürnberg
Staatsangehörigkeit:	deutsch
Eltern:	DB-Amtsrat Heinrich Körbel und Frau Erna Körbel, geb. Baumann
Familienstand:	seit dem 13.5.1976 verheiratet mit Maria Körbel, geb. Naber
Wohnort:	Zum Brühl 5 8501 Behrangersdorf

Schulausbildung/Wehrdienst/Studium

1954 - 1958	Volksschule in Nürnberg
1958 - 1967	Martin-Behaim-Gymnasium Nürnberg
1967	Abitur
1967 - 1969	Grundwehrdienst in Günzburg
1969 - 1974	Mathematik- und Physikstudium an der Universität Erlangen-Nürnberg
Herbst 1971	Vorexamen in Mathematik und Physik
14.5.1974	Diplom-Hauptprüfung für Mathematik

Berufliche Tätigkeit

18.9.1974 - 16.9.1976	Ausbildung für das Höhere Lehramt an Gymnasien in Bayern
17.9.1976 - 31.7.1977	Lehrer am Institut der Englischen Fräulein in Nürnberg
seit 1.8.1977	Studienrat im Höheren Schuldienst der Stadt Nürnberg
seit 1.5.1983	Oberstudienrat

